

Eine neue Methode zur Berechnung von thermischen Gitterstörungen

Inaugural - Dissertation
zur Erlangung der Doktorwürde
des Fachbereichs Physik
der Freien Universität Berlin

vorgelegt von
Diplom-Physiker
Dimitrios Tsobanis
aus Yannitsa/Griechenland

1970

Eine neue Methode zur Berechnung von thermischen Gitterstörungen

Inaugural - Dissertation

**zur Erlangung der Doktorwürde
des Fachbereichs Physik
der Freien Universität Berlin**

vorgelegt von

Diplom-Physiker

Dimitrios Tsobanis

aus Yannitsa/Griechenland

1. Referent: Professor Dr. R. Hosemann

2. Referent: Professor Dr. H. Niehrs



Tag der mündlichen Prüfung: 28. 10. 1970

Tag der Promotion:

Inhaltsverzeichnis

	Seite
Einleitung	1
I. Einiges über die neue Methode zur Berechnung von thermischen Gitterstörungen.	3
II. Aufstellung der Differenzengleichungen.	13
III. Überführung der Differenzengleichungen in Differentialgleichungen und Lösung derselben.	22
IV. Diskussion der mit dem Übergang zur kon- tinuierlichen Beschreibung verbundenen Fehler. Vergleich mit den Ergebnissen von Frenkel.	29
Anhang I	38
Anhang II	42
Anhang III	49
Anhang IV	52
Anhang V	54
Anhang VI	57
Zusammenfassung	63
Literaturverzeichnis	66



Digitized by the Internet Archive
in 2026

Einleitung:

Ein Kristall besteht aus einer regelmäßigen Anordnung von Atomen in einem räumlichen Gitter. Infolge der thermischen Bewegung der Atome wird jedoch die ideale Gitterstruktur gestört und bleibt nur im zeitlichen Mittel erhalten.

Bei den Strukturuntersuchungen mittels Beugung von Röntgenstrahlen oder Neutronen treten die thermischen Bewegungen der Gitterteilchen störend in Erscheinung. Das Maßgebende für diese Störung ist der Mittelwert der Größe [1] [2] [9]

$$\langle \vec{b} (\vec{u}(N) - \vec{u}(0))^2 \rangle$$

Die Vektorgröße $\vec{b}$ ist durch Gleichung

$$\vec{b} = \frac{\vec{s} - \vec{s}_0}{\lambda}$$

gegeben, wobei $\vec{s}$ der Einheitsvektor in Richtung der gestreuten, $\vec{s}_0$ der Einheitsvektor in Richtung der primär einfallenden Strahlung ist und λ ihre Wellenlänge bedeutet. $\vec{u}(N)$, $\vec{u}(0)$ bedeuten die Verschiebungen des N-ten Atoms bzw. 0-ten Atoms von der Gleichgewichtslage. Für die Berechnung von Abstandsschwankungen zweier Atome des Kristalls infolge der thermischen Bewegung hat Debye [3] [4] keine Korrelationseffekte berücksichtigt. Wie es bei der ursprünglichen Einsteinschen Theorie der spezifischen Wärme der Fall war, wurden von Debye bei diesen Berechnungen alle Atome als voneinander unabhängig betrachtet und jedes derselben als einfaches schwingendes Gebilde in die Rechnung eingeführt.

Später wurden durch Peierls [5] [6], Frenkel [7], Walker und Keating [8] Rechnungen mit Berücksichtigung der Korrelationseffekte durchgeführt. Für die Berechnung der mittleren Abstandsschwankungen zwischen zwei Gitterteilchen gehen sie von der Annahme aus, daß sich die Bewegung der

Gitterteilchen durch eine Superposition ebener Wellen darstellen läßt. Die dabei verwendete Methode sieht eine Reihe von Näherungsannahmen vor, die im Abschnitt IV im einzelnen aufgeführt werden.

Um den Einfluß dieser Näherungsannahmen auf das Ergebnis zu studieren, wird in der vorliegenden Arbeit ein einfaches zweidimensionales Modell betrachtet und zwar ein hexagonales Gitter mit harmonischen Kräften zwischen nächsten Nachbarn. Für diese Wahl waren zwei Gründe maßgebend. Erstens ist das zweidimensionale hexagonale Gitter bereits stabil, wenn nur Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn angenommen werden. (Ein quadratisches Gitter würde in dieser einfachen Näherung einem System linearer Ketten entsprechen.) Zweitens ist dieses Gitter eine gute erste Näherung für lineare Hochpolymere orthogonal zur Kettenrichtung, wie sie in diesem Institut untersucht werden.

Es wird hierbei eine neue Methode verwendet, bei der einige Schwierigkeiten der oben erwähnten Arbeiten umgangen werden. Wie auch die oben genannten Autoren setzen wir voraus, daß die Temperatur hinreichend hoch ist, so daß man die klassische Boltzmann-Statistik zur Berechnung thermischer Mittelwerte anwenden kann. Es sei noch erwähnt, daß sowohl die oben erwähnten Arbeiten, wie auch die vorliegende Arbeit die harmonische Näherung für die potentielle Energie des Gitters voraussetzen.

Der Übersichtlichkeit halber werden im Folgenden einige elementare aber langwierige Rechnungen aus dem Text herausgenommen und im Anhang wiedergegeben.

I. Einiges über die neue Methode zur Berechnung von thermischen Gitterstörungen.

Wir betrachten im Folgenden ein System aus endlich vielen Teilchen der Masse M , deren Bewegung auf eine Ebene (x - y Ebene) beschränkt sein soll. Die Lage eines Teilchens N sei durch den Vektor

$$\vec{r}_N = \vec{r}_N + \vec{u}_N \quad (I. 1)$$

beschrieben. Dabei bezeichnet $\vec{r}_N$ einen Punkt des ungestörten hexagonalen Gitters:

$$\vec{r}_N = a [n\vec{e}_0 + m\vec{e}_1] \quad (I. 2)$$

Dabei bezeichnen wir mit $\vec{e}_k$ Einheitsvektoren, die gegenüber der positiven x -Achse um $k \cdot 60^\circ$ gedreht sind ($k=0, 1, 2 \dots 5$ $\vec{e}_6 = \vec{e}_0$ etc.).

Das Symbol N charakterisiert einen Punkt des idealen Gitters und steht als Abkürzung für (n, m).

$\vec{u}_N$ bezeichnet gemäß Gleichung (I. 1) die momentane Abweichung der Lage eines Teilchens von der Stelle $\vec{r}_N$. Als Wechselwirkung zwischen den Teilchen werden harmonische Kräfte zwischen nächsten Nachbarn angenommen, so daß sich die potentielle Energie des Systems in der Form

$$V = \frac{1}{4} M \omega_0^2 \sum_N \sum_K (|\vec{r}_{N+E_K} - \vec{r}_N| - a)^2 \quad (I. 3)$$

darstellen läßt.* $N+E_K$ bezeichnet dabei den zu N be-

*) $\frac{1}{2} M \omega_0^2 (r - a)^2$ sei die potentielle Energie einer "Feder", die von ihrer Gleichgewichtslage a auf die r gebracht wurde. In Gleichung (I.3) tritt der Faktor $\frac{1}{4}$ auf, weil bei der Summe über alle Gitterpunkte (N) jede "Feder" zweimal gezählt wird.

nachbarten (idealen) Gitterpunkt mit der Lage

$$\vec{r}_{N+E_k} = \vec{r}_N + a \vec{e}_k \quad (I. 4)$$

Die Summe über k läuft über alle 6 Werte ($k = 0, 1 \dots 5$), falls N ein innerer Punkt des Gitters ist, im Falle eines Randpunktes nur über diejenigen k , für die die Nachbarkunkte $N + E_k$ noch besetzt sind.

Es sei für das Folgende vorausgesetzt, daß sich die Abstände benachbarter Teilchen nur wenig vom Gleichgewichtsabstand unterscheiden. Dann kann man wegen

$$\begin{aligned} |\vec{r}_{N+E_k} - \vec{r}_N| &= |\vec{r}_{N+E_k} - \vec{r}_N + \vec{u}(N+E_k) - \vec{u}(N)| \\ &= |a \vec{e}_k + \vec{u}(N+E_k) - \vec{u}(N)| \end{aligned} \quad (I. 5)$$

$$= a \sqrt{1 + \frac{2}{a} [\vec{e}_k (\vec{u}(N+E_k) - \vec{u}(N))] + \frac{1}{a^2} [\vec{u}(N+E_k) - \vec{u}(N)]^2}$$

näherungsweise

$$|\vec{r}_{N+E_k} - \vec{r}_N| \approx a + \vec{e}_k (\vec{u}(N+E_k) - \vec{u}(N)) \quad (I. 6)$$

setzen. Damit geht Gleichung (I.3) über in

$$V = \frac{1}{4} M \omega_c^2 \sum_N \sum_{k=0}^5 [\vec{e}_k (\vec{u}(N+E_k) - \vec{u}(N))]^2 \quad (I. 7a)$$

Für die im Folgenden verwendete Methode ist es zweckmäßig eine Matrixschreibweise zu benutzen. Und zwar sollen die rechtwinkligen Komponenten sämtlicher Auslegungsvektoren $\vec{u}(N)$ ($u_x(N)$, $u_y(N)$) in der Form eines Spaltenvektors angeordnet werden, den wir künftig mit u bezeichnen wollen und dessen Komponentenzahl mit der Zahl der Freiheitsgrade des Systems übereinstimmt:

$$u = \begin{pmatrix} \vdots \\ u_x(N) \\ \vdots \\ u_y(N) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (I. 8)$$

Bezeichnen wir den zu u transponierten Vektor mit u^+ , dann läßt sich die potentielle Energie, Gleichung (I.7a), allgemein in der Form

$$V = \frac{1}{2} u^+ C u \quad (I.7)$$

schreiben, wobei C eine quadratische, reelle und symmetrische Matrix ist, welche den sogenannten Kopplungskoeffizienten zweiter Ordnung der potentiellen Energie entspricht.

Aus Symmetrie Gründen erweist es sich als zweckmäßig spezielle Spaltenvektoren $e_k(N)$ einzuführen, die einer Konfiguration entsprechen, bei der nur ein Teilchen (N) mit dem Vektor $\vec{e}_k$ aus seiner Gleichgewichtslage $(\vec{r}_N)$ ausgelenkt ist, d.h.

$$e_k(N) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ (\vec{e}_x \vec{e}_k) \\ (\vec{e}_y \vec{e}_k) \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (I.9)$$

*) Für spätere Verwendungen sei angedeutet, daß im Falle komplexer Komponenten einer Matrix A unter A^+ die zu A transponierte und konjugiert komplexe Matrix verstanden werden soll.

Es besteht dann der Zusammenhang

$$(\vec{e}_k \vec{u}(n)) = e_k^+(n) u = u^+ e_k(n). \quad (I.10)$$

und aus Gleichung (I.7a) erhält man V in der Form

$$V = \frac{1}{4} M \omega_0^2 \sum_N \sum_K [u^+(e_k(n+E_k) - e_k(n))(e_k^+(n+E_k) - e_k^+(n))u] \quad (I.11)$$

woraus sich für die Matrix C die Darstellung (siehe Gleichung I. 7)

$$C = \frac{1}{2} M \omega_0^2 \sum_N \sum_K [e_k(n+E_k) - e_k(n)][e_k^+(n+E_k) - e_k^+(n)] \quad (I.12)$$

ergibt. Es sei noch einmal darauf hingewiesen, daß falls N ein Randpunkt des Kristalls ist, nur über diejenigen K zu summieren ist, für die $N + E_K$ zum Gitter gehört (vergleiche Gleichung I.3).

Es kommt nun darauf an, die Abstandsschwankung zwischen zwei Teilchen zu bestimmen, deren ideale Lage im Gitter durch

$$\vec{r}_N = a(n \vec{e}_0 + m \vec{e}_1) \quad (I.13)$$

und $\vec{r}_0 = 0$

gegeben sei. Genauer gesagt, es interessiert uns der thermische Mittelwert der Größe

$$(\gamma_{N0} - \bar{\gamma}_{N0})^2 \quad (I.14)$$

wobei

$$\gamma_{N0} = |\vec{\gamma}_N - \vec{\gamma}_0| = |\vec{\gamma}_N + \vec{u}(N) - \vec{u}(0)| \quad (I.15)$$

ist. Bezeichnen wir diesen Mittelwert mit $\delta\gamma_{N0}^2$,
so gilt zunächst

$$\delta\gamma_{N0}^2 = \overline{(\gamma_{N0} - \bar{\gamma}_{N0})^2} = \overline{\gamma_{N0}^2} - \bar{\gamma}_{N0}^2 \quad (I.16)$$

und man erhält auf ähnliche Weise wie in Gleichung
(I.5) bei Vernachlässigung von Gliedern vierter und
höherer Ordnung in den Auslenkungen hierfür die Formel

$$\delta\gamma_{N0}^2 = \overline{\left[\frac{\vec{\gamma}_N}{\gamma_N} (\vec{u}(N) - \vec{u}(0)) \right]^2} \quad (I.17)$$

welche wir unter Berücksichtigung der Beziehung (siehe
Gleichung I.13)

$$\frac{\vec{\gamma}_N}{\gamma_N} = \frac{n\vec{e}_0 + m\vec{e}_1}{\sqrt{n^2 + nm + m^2}} \quad (I.18)$$

auch in die Form

$$\begin{aligned} \delta\gamma_{N0}^2 &= \frac{1}{n^2 + nm + m^2} \left[n\vec{e}_0 \cdot \vec{u}(N) + m\vec{e}_1 \cdot \vec{u}(N) - n\vec{e}_0 \cdot \vec{u}(0) - m\vec{e}_1 \cdot \vec{u}(0) \right]^2 \\ &= \frac{1}{n^2 + nm + m^2} \left[(ne_0^+(N) + me_1^+(N))u - (ne_0^+(0) + me_1^+(0))u \right]^2 \end{aligned} \quad (I.19)$$

bringen können. Dabei wurde von der Beziehung (I.10) Gebrauch gemacht. Führen wir zur Abkürzung die Beziehung

$$e_{n,m}(n') = \frac{n e_0(n') + m e_1(n')}{\sqrt{n^2 + n m + m^2}} \quad (\text{I.20})$$

ein, so erhalten wir schließlich

$$\delta r_{n0}^2 = \overline{u^+ A_{n0} u} \quad (\text{I.21})$$

wobei die Matrix A_{n0} durch

$$A_{n0} = (e_{nm}(n) - e_{nm}(0))(e_{nm}^+(n) - e_{nm}^+(0)) \quad (\text{I.22})$$

gegeben ist.

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, wollen wir voraussetzen, daß die Temperatur hinreichend hoch ist, so daß sich der thermische Mittelwert einer Observablen nach der klassischen Boltzmann-Statistik berechnen läßt. In unserem Falle bedeutet dieses,

$$\overline{u^+ A_{n0} u} = \frac{\int u^+ A_{n0} u \exp(-\frac{1}{2} u^+ C u / kT) dv_n}{\int \exp(-\frac{1}{2} u^+ C u / kT) dv_n} \quad (\text{I.23})$$

dabei bedeutet dv_n das Volumenelement im Konfigurationsraum

$$dv_n = \prod_N du_x(n) du_y(n). \quad (\text{I.24})$$

Wie im Anhang I gezeigt wird, erhält man für Gleichung (I.23)

$$\overline{u^* A_{n_0} u} = kT \operatorname{Spur} (C^{-1} A_{n_0}) \quad (I.25)$$

wobei die Spur einer Matrix als Summe der Diagonalglieder definiert ist. Da die Matrix C auch Eigenfunktionen zum Eigenwert Null besitzt, (siehe Anhang II)

$$C \overset{\circ}{\Phi}_v = 0 \quad (I.26)$$

so daß ihre Determinante verschwindet, bedarf das in Gleichung (I.25) verwendete Symbol C^{-1} noch der Definition. Und zwar ist hiermit diejenige Matrix gemeint, die den Gleichungen

$$C C^{-1} = 1 - P_0 \quad (I.27a)$$

und

$$P_0 C^{-1} = 0 \quad (I.27b)$$

genügt. Dabei bedeutet P_0 den Projektionsoperator auf den Teilraum der Eigenvektoren zum Eigenwert Null:

$$P_0 = \sum_v \overset{\circ}{\Phi}_v \overset{\circ}{\Phi}_v^+ \quad (I.28)$$

Die Matrix C^{-1} ist durch die beiden Gleichungen (I.27) eindeutig definiert (siehe Anhang I). Falls P_0 verschwindet, ist C^{-1} also invers zu C, andernfalls könnte man es "partiell invers" nennen. Verschwindendes P_0 bedeutet physikalisch, daß die potentielle Energie des Kristalls auch von seiner absoluten Lage und Orientierung im Raum

abhängt. Dies wäre z.B. dann der Fall, wenn man den Kristall in einem äußeren festen Rahmen einspannen würde.

Die vorliegende Arbeit möchte aber bewußt daran festhalten, daß die potentielle Energie nur von den Relativkoordinaten der Gitterteilchen und nicht von deren absoluter Lage im Raum abhängt.

In diesem Zusammenhang sei darauf hingewiesen, daß die in der Literatur üblicherweise benutzte Voraussetzung, daß die Gitterteilchen "kleine Schwingungen" um ihre Gleichgewichtslage ausführen, keineswegs selbstverständlich ist, und sich im Falle unseres Modells auch als unrichtig herausstellt (siehe unten). In dieser Arbeit wurde hingegen lediglich vorausgesetzt, daß sich die Abstände benachbarter Gitterteilchen nur wenig vom Gleichgewichtsabstand unterscheiden (siehe Gl. I.5) .

Berücksichtigt man, daß die Spur einer Matrix der Form $\alpha \beta^+$ (α und β sind Vektoren) durch

$$\text{Spur}(\alpha \beta^+) = \beta^+ \alpha \quad (\text{I.29})$$

gegeben ist, so erhält man mit dem Ausdruck (I.22) für A_{n0} aus Gleichung (I.25)

$$\hat{u}^+ A_{n0} u = kT (e_{nm}^+(n) - e_{nm}^+(0)) \hat{C}^{-1} (e_{nm}(n) - e_{nm}(0)) \quad (\text{I.30})$$

Es kommt also alles auf die Bestimmung des Vektors $\hat{C}^{-1} (e_{nm}(n) - e_{nm}(0))$ an. Bezeichnen wir diesen für den Augenblick mit f , so folgt aus den Gleichungen (I.27) hierfür:

$$C f = (1 - P_0) (e_{nm}(N) - e_{nm}(0)) \quad (I.31a)$$

$$P_0 f = 0 \quad (I.31b)$$

Für Systeme mit nicht zu vielen Freiheitsgraden (d.h. hinreichend kleine Kristalle) könnte man dieses Gleichungssystem numerisch lösen. Für größere Systeme hingegen bietet sich ein anderer Weg an.

Wie im folgenden Kapitel des Näheren ausgeführt wird, hat die Gleichung (I.31a) den Charakter einer Differenzengleichung, deren (Näherungsweise) Lösung dadurch erleichtert wird, daß sich die Lösung der entsprechenden Differentialgleichung angeben läßt (siehe Kapitel III).

Wir wollen im Folgenden eine Beziehung benutzen, die strenggenommen nur im Grenzfall eines unendlich ausgedehnten Kristalls gültig ist, aber bei endlichen Kristallen eine sinnvolle Näherung darstellen dürfte, sofern Randeffekte keine wesentliche Rolle spielen. Und zwar nehmen wir an, daß die Matrix C^{-1} "Translationsinvariant" ist, so daß man

$$e_{nm}^+(N) C^{-1} e_{nm}(N) = e_{nm}^+(0) C^{-1} e_{nm}(0) \quad (I.32)$$

setzen darf. (Für die Matrix C gilt diese Beziehung übrigens streng, sofern N und 0 innere Punkte des Kristalls sind.)

Wegen der Symmetrie von C^{-1} (siehe Anhang I)

$$e_{nm}^+(0) C^{-1} e_{nm}(N) = e_{nm}^+(N) C^{-1} e_{nm}(0). \quad (I.33)$$

geht der Ausdruck (I.30) in die Form

$$\overline{u^{\dagger} A_{N0} u} = -kT (e_{nm}^{\dagger}(v) - e_{nm}^{\dagger}(o)) \tilde{C}^{-1} e_{nm}(o). \quad (I.34)$$

über.

Unsere Aufgabe wird es sein, den Ausdruck (I.34) zu berechnen, wofür wir uns im nächsten Abschnitt zunächst die nötigen Hilfsmittel zurechtlegen wollen.

II. Aufstellung der Differenzengleichungen.

Bevor wir die Differenzengleichungen (I.31) explizit angeben, ist es von entscheidender Bedeutung für die weiteren Rechnungen, die Symmetrieeigenschaften der potentiellen Energie zu untersuchen, d.h. es werden solche Transformationen untersucht, die die potentielle Energie invariant lassen.

Wir wollen diese Transformationen mit T bezeichnen. Die Konfiguration des Kristalls, die durch den Vektor u Gleichung (I.8) charakterisiert ist, gehe bei der Transformation T in

$$u' = T u$$

über, und es soll also gelten

$$V(u) = \frac{1}{2} u^T C u = V(u') = \frac{1}{2} u'^T T^T C T u. \quad (\text{II. 1})$$

Für die Matrix C gilt also

$$C = T^T C T \quad (\text{II. 2})$$

woraus unter der Bedingung

$$T T^T = 1 \quad (\text{II. 3})$$

die Vertauschbarkeit

$$C T = T C \quad (\text{II. 4})$$

folgt.

Definieren wir eine Drehung D (um 60°) und eine Spiegelung S (an der x -Achse) durch die folgenden Gleichungen:

$$D e_k(N) = e_{k+1}(DN) \quad (\text{II. 5a})$$

$$S e_k(N) = e_{-k}(SN) \quad (\text{II. 5b})$$

(Mit DN bzw. SN bezeichnen wir den Gitterpunkt, der aus N durch diese Drehung bzw. Spiegelung hervorgeht), dann findet man durch Anwendung auf den Ausdruck (I.12) für C folgende Beziehung

$$D^+ C D = C \quad (\text{II. 6a})$$

$$S^+ C S = C \quad (\text{II. 6b})$$

d.h. D und S sind solche Transformationen, die die potentielle Energie invariant lassen.

Man sieht leicht, daß für D und S die Bedingung (II.3) erfüllt ist, so daß

$$D C = C D \quad (\text{II. 7a})$$

und

$$S C = C S \quad (\text{II. 7b})$$

gilt.

Wie im Anhang III gezeigt wird, folgen hieraus auch die entsprechenden Relationen für C^{-1} :

$$D C^{-1} = C^{-1} D \quad (\text{II. 8a})$$

$$S C^{-1} = C^{-1} S \quad (\text{II. 8b})$$

Um die Symmetrie des zugrunde gelegten Modells besser ausnutzen zu können, ist es vorteilhaft, eine neue Basis einzuführen und zwar folgendermaßen:

$$e_{\pm}(N) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e_0(N) \pm i e_y(N) \right] \quad (\text{II. 9})$$

$$\text{mit } e_y(N) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[e_1(N) + e_2(N) \right]$$

Die Vektoren $e_{\pm}(N)$ bilden ein vollständiges und orthogonales System.

Es läßt sich sehr leicht zeigen, daß man durch Anwendung von D und S folgende Beziehungen erhält:

$$D e_{\pm}(N) = \exp\left(\mp i \frac{\pi}{3}\right) e_{\pm}(0N) \quad (\text{II. 10})$$

$$S e_{\pm}(N) = e_{\mp}(SN) \quad (\text{II. 11})$$

Durch die Spiegelung und Drehung werden nun nicht mehr die sechs e_k , sondern nur noch die zwei $e_{\pm}$ ineinander überführt, was die folgende Rechnung wesentlich vereinfachen wird.

Wir wollen nun den Ausdruck (I.34) für
auf die neue Basis umrechnen.

$$\overline{u^+ A_{n0} u}$$

Wegen (siehe Gleichung (I.20))

$$e_{nm}(N) = \frac{n e_0(N) + m e_1(N)}{\sqrt{n^2 + nm + m^2}} \quad (\text{II.11a})$$

sind also $e_0(N)$ und $e_1(N)$ durch $e_{\pm}(N)$ auszudrücken. Aus Gleichung (II. 9) erhält man hierfür den Zusammenhang:

$$e_0(N) = \frac{1}{\sqrt{2}} (e_+(N) + e_-(N)) \quad (\text{II.12a})$$

und
$$e_1(N) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\exp(-i\frac{\pi}{3}) e_+(N) + \exp(i\frac{\pi}{3}) e_-(N) \right) \quad (\text{II.12b})$$

Hiermit läßt sich der Ausdruck (I.34) leicht umformen. Man erhält

$$\overline{u^+ A_{n0} u} = -\frac{\kappa T}{z_N \bar{z}_N^*} \left[z_N e_+^+(N) + \bar{z}_N^* e_-^+(N) - z_N e_+^+(0) - \bar{z}_N^* e_-^+(0) \right] \cdot \bar{C}^{-1} \left[z_N^* e_+(0) + \bar{z}_N e_-(0) \right] \quad (\text{II.13})$$

wobei zur Abkürzung

$$\bar{z}_N = n + m \cdot \exp(i\frac{\pi}{3})$$

gesetzt wurde. Da auf Grund von (II.9)

$$e_-(N) = e_+^*(N).$$

und die Matrix C^{-1} reell ist, gilt

$$e_+^+(\nu) C^{-1} e_-(0) = (e_+^+ C^{-1} e_+(0))^* \quad (\text{II.14})$$

Es läßt sich somit die gesuchte Größe auf den Vektor $C^{-1} e_+(0)$ zurückführen, den wir mit φ_+ bezeichnen wollen:

$$C^{-1} e_+(0) = \varphi_+ \quad (\text{II.15})$$

Definieren wir nun mit Hilfe der beiden Spaltenvektoren (II.9) die folgenden zwei skalaren Funktionen

$$\nu(\nu) = m \omega_0^2 e_+^+(\nu) \varphi_+ \quad (\text{II.16a})$$

$$\omega(\nu) = m \omega_0^2 e_-^+(\nu) \varphi_+ \quad (\text{II.16b})$$

so erhalten wir mit (II.16) aus (II.13)

$$\overline{u^\dagger A_{\nu_0} u} = - \frac{2kT}{m\omega_0^2} \operatorname{Re} \left[\nu(\nu) - \nu(0) + \frac{2N}{2N} (\nu(\nu) - \nu(0)) \right] \quad (\text{II.17})$$

Um die Schwankungsquadrate $\overline{u^\dagger A_{\nu_0} u}$ zu berechnen, muß man also die Funktionen $\nu(N)$ und $\omega(N)$ kennen.

Zunächst untersuchen wir die Transformationseigenschaften von $\nu(N)$ und $\omega(N)$ bei Drehung und Spiegelung. So erhält man z.B. mit Hilfe von Gleichung (II.10)

$$\begin{aligned} v(DN) &= e_+^+(DN) \varphi_+ = \exp(-i \frac{\pi}{3}) (De_+(N))^+ \varphi_+ = \\ &= \exp(-i \frac{\pi}{3}) e_+^+(N) D^+ \varphi_+ = \exp(-i \frac{\pi}{3}) e_+^+(N) D^+ \bar{C}^{-1} e_+(0) \end{aligned}$$

Nun folgt aber aus Gleichung (II. 8a)

$$\bar{C}^{-1} D^+ = D^+ \bar{C}^{-1}$$

also

$$D^+ \bar{C}^{-1} e_+(0) = \bar{C}^{-1} D^+ e_+(0) = \exp(i \frac{\pi}{3}) \bar{C}^{-1} e_+(0) = \exp(i \frac{\pi}{3}) \varphi_+$$

folglich

$$v(DN) = v(N) \quad (\text{II.18})$$

Auf ganz entsprechende Weise findet man

$$w(DN) = \exp(2i \frac{\pi}{3}) w(N). \quad (\text{II.19})$$

Ferner gilt wegen Gleichung (II.11) und $S^+ = S$

$$\begin{aligned} v(SN) &= e_+^+(SN) \varphi_+ = (Se_-(N))^+ \varphi_+ = e_-^+(N) S \varphi_+ = \\ &= e_-^+(N) S \bar{C}^{-1} e_+(0) = e_-^+(N) \bar{C}^{-1} S e_+(0) = e_-^+(N) \bar{C}^{-1} e_-(0). \end{aligned}$$

Aus Gleichung (II.14) folgt aber

$$e_{-}^{+}(N) C^{-1} e_{-}(0) = (e_{+}^{+}(N) C^{-1} e_{+}(0))^{*}$$

also

$$v(SN) = v(N)^{*} \quad (\text{II.20})$$

Auf dieselbe Weise erhält man

$$w(SN) = w(N)^{*} \quad (\text{II.21})$$

Für die Funktionen $v(N)$ und $w(N)$ kann man nun aus Gleichung (I.27a) zwei Differenzengleichungen aufstellen. Und zwar erhält man aus Gleichung (I.27a) durch rechte Multiplikation mit $e_{+}(0)$:

$$C C^{-1} e_{+}(0) = C \varphi_{+} = (1 - \rho_0) e_{+}(0). \quad (\text{II.22})$$

Drücken wir im Ausdruck (I.12) für C die $e_k(N)$ durch die $e_{\pm}(N)$ aus, so erhält man (siehe Anhang IV) hieraus

$$\begin{aligned} C \varphi_{+} &= \frac{M \omega_0^2}{2} \sum_{N, k} [e_{+}(N) [e_{+}^{+}(N) - e_{+}^{+}(N + E_k) + \exp(-2i \frac{\pi}{3}) [e_{-}^{+}(N) - e_{-}^{+}(N + E_k)]] \varphi_{+} \\ &+ \frac{M \omega_0^2}{2} \sum_{N, k} [e_{-}(N) [e_{-}^{+}(N) - e_{-}^{+}(N + E_k) + \exp(2i \frac{\pi}{3}) (e_{+}^{+}(N) - e_{+}^{+}(N + E_k))] \varphi_{+} \\ &= (1 - \rho_0) e_{+}(0). \end{aligned}$$

(II.23)

Wie im Anhang II gezeigt wird, ist

$$\rho_0 e_+(0) = \Gamma^2 \sum_N e_+(N)$$

wobei

$$\frac{1}{\Gamma^2} = \sum_N 1$$

die Anzahl der Gitterteilchen ist.

Damit geht Gleichung (II.23) unter Berücksichtigung der Beziehung (II.16) in

$$\frac{1}{2} \sum_{N,K} e_+(N) \left[v(N) - v(N+E_K) + \exp(-2i \frac{\pi}{3} K) (\omega(N) - \omega(N+E_K)) \right] +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{N,K} e_-(N) \left[\omega(N) - \omega(N+E_K) + \exp(2i \frac{\pi}{3} K) (v(N) - v(N+E_K)) \right] =$$

$$= \sum_N (\delta_{N0} - \Gamma^2) e_+(N).$$

über. Wegen der linearen Unabhängigkeit der Vektoren

$e_{\pm}(N)$ erhält man hieraus folgende zwei Differenzengleichungen für v und ω :

$$\frac{1}{2} \sum_K \left[v(N) - v(N+E_K) + \exp(-2i \frac{\pi}{3} K) (\omega(N) - \omega(N+E_K)) \right] = \delta_{N0} - \Gamma^2$$

und

(II.24a)

$$\sum_K \left[\omega(N) - \omega(N+E_K) + \exp(2i \frac{\pi}{3} K) (v(N) - v(N+E_K)) \right] = 0$$

(II.24b)

Hierzu kommt noch die Nebenbedingung (I.27b)

$$\rho_0 C^{-1} e_+(0) = \rho_0 \varphi_1 = 0$$

(II.25a)

welche, wie in Anhang II gezeigt wird mit der Bedingung

$$\sum_N \nu(N) = 0 \quad (\text{II.25})$$

äquivalent ist.

Im nächsten Abschnitt werden wir eine Näherungslösung für die Funktionen $\nu(N)$ und $\omega(N)$ ermitteln, indem wir die Differenzengleichungen in Differentialgleichungen umformen und deren Lösung untersuchen.

III. Überführung der Differenzengleichungen in Differentialgleichungen und Lösung derselben.

Um zu einer Näherungslösung der Differenzengleichungen zu gelangen, führen wir die Differenzengleichungen (II.24) in Differentialgleichungen über und lösen die letzteren. Wie gut diese Näherung ist, werden wir im Abschnitt IV untersuchen.

Dazu stellen wir die Funktionswerte in den Gitterpunkten durch die entsprechenden Ableitungen dar, und zwar auf folgende Weise:

Wir wählen einen inneren Punkt N im Gitter aus, und ordnen ihm die kartesischen Koordinaten x und y zu. Dann haben die sechs nächst benachbarten Gitterpunkte ($N + E_0 \dots N + E_5$) folgende Koordinaten:

$$(x+a, y) \quad \left(x+\frac{1}{2}a, y+\frac{\sqrt{3}}{2}a\right) \quad \left(x-\frac{1}{2}a, y+\frac{\sqrt{3}}{2}a\right)$$

$$(x-a, y) \quad \left(x-\frac{1}{2}a, y-\frac{\sqrt{3}}{2}a\right) \quad \left(x+\frac{1}{2}a, y-\frac{\sqrt{3}}{2}a\right)$$

Anstelle der nur in den Gitterpunkten definierten Funktionen $\mathcal{V}(N)$ und $\mathcal{W}(N)$ suchen wir nun Funktionen, die in der ganzen Ebene definiert sind und die wir einfachshalber mit denselben Symbolen bezeichnen wollen, also mit $\mathcal{V}(x,y)$ und $\mathcal{W}(x,y)$. Da es nach Gleichung (II.17) auf die Differenzen der Funktionen $\mathcal{V}$ und $\mathcal{W}$ ankommt, nämlich

$$v(N) - v(0) \quad (\text{III. 1a})$$

und $w(N) - w(0).$

wollen wir beim Übergang zur kontinuierlichen Beschreibung von diesen Funktionen (III.1a) ausgehen und ihnen Funktionen der kontinuierlichen Variablen (x,y) zuordnen, die wir einfachheitshalber mit denselben Symbolen bezeichnen wollen $(v(x,y), w(x,y))$. Auf Grund von Gleichung (III.1a) gilt dann die Bedingung

$$v(0,0) = 0 \quad (\text{III. 1b})$$

$$w(0,0) = 0.$$

Die in den Gleichungen (II.24) auftretenden Differenzen

$v(N+E_k) - v(N)$ und $w(N+E_k) - w(N)$ drücken wir dann durch die Ableitungen der Funktionen $v(x,y)$ und $w(x,y)$ aus.

Z.B.

$$v(N+E_0) - v(N) = v(x+a, y) - v(x, y) \approx \quad (\text{III. 2})$$

$$\approx a \frac{\partial v(x,y)}{\partial x} + \frac{a^2}{2!} \frac{\partial^2 v(x,y)}{\partial x^2} + \dots$$

Auf diese Weise erhält man (bei Vernachlässigung von Gliedern höherer als zweiter Ordnung) folgende Beziehungen. (ψ steht für v oder w).

$$\begin{aligned} \sum_k \psi(N+E_k) - \psi(N) &= \frac{3a^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x,y) = \\ &= \frac{3a^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi(x,y) \end{aligned} \quad (\text{III. 3a})$$

$$\sum_k \exp(i 2, \frac{\pi}{3} k) (\psi(N + \epsilon_k) - \psi(N)) =$$

$$= \frac{3a^2}{4} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \psi(x, y) \quad (\text{III. 3b})$$

Die in Gleichung (II.24) auftretende Singularität δ_{NO} ersetzen wir durch eine Funktion, die innerhalb eines Kreises

$$r < r_0$$

den Wert eins, außerhalb desselben den Wert null hat. Dabei wählen wir r_0 so, daß der Flächeninhalt dieses Kreises der einen Elementarzelle entspricht.

$$\pi r_0^2 = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \quad (\text{III. 4})$$

Damit erhalten wir aus Gleichung (II.24) folgende partielle Differentialgleichungen:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) w + 2 \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) v \right] = \rho(r)$$

(III. 5a)

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) v + 2 \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) w \right] = 0$$

mit

$$\rho(r) = \begin{cases} -\frac{8}{3a^2} (1-r^2) & \text{für } r \leq r_0 \\ \frac{8}{3a^2} r^2 & \text{für } r \geq r_0 \end{cases} \quad (\text{III. 5b})$$

Auf Grund der Symmetrieeigenschaften von $v(N)$ und $w(N)$ bei Drehung und Spiegelung (siehe Gleichungen von (II.18) bis (II.21) empfiehlt es sich für die Lösung der Differentialgleichungen (III.4) den Ansatz

$$v = v(r) \quad \text{mit} \quad x = r \cos \phi \quad (\text{III. 6a})$$

$$w = \tilde{w}(r) e^{2i\phi} \quad y = r \sin \phi \quad (\text{III. 6b})$$

zu machen, wobei $v(r)$ und $\tilde{w}(r)$ reell sind.

Hierdurch lassen sich die partiellen Differentialgleichungen (III.4) in gewöhnliche Differentialgleichungen überführen. Und zwar erhält man mit Hilfe der Beziehung

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) f(r) = \dot{f}(r) \cdot \exp(i\phi) \quad (\text{III.7})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) g(\phi) = \pm \frac{i}{r} \cdot \exp(i\phi) \cdot g'(\phi).$$

aus Gleichung (III. 4a)

$$\frac{d}{dr} \left[r \left(\frac{2}{r} \tilde{w}(r) + \frac{d\tilde{w}}{dr}(r) + 2 \frac{dv(r)}{dr} \right) \right] = r \rho \quad (\text{III. 8a})$$

und aus Gleichung (III. 4b)

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \left(v' + 2 \tilde{w}' + 4 \frac{\tilde{w}}{r} \right) \right) = 0 \quad (\text{III. 8b})$$

Gemäß Gleichung (III. 4a) hat $\rho(r)$ eine Unstetigkeitsstelle bei $r=r_0$. Wir werden daher in den Bereichen $r < r_0$ und $r > r_0$ verschiedene analytische Ausdrücke für die Lösungsfunktionen zu erwarten haben. Dabei wollen wir die Forderung stellen, daß $v, v', \tilde{w}$ und $\tilde{w}'$ stetig sind. Dann enthält die allgemeine Lösung der Differentialgleichungen (III.7), da sie von zweiter Ordnung sind, noch vier Integrationskonstanten. Die ersten beiden Nebenbedingungen für die vier Integrationskonstanten der Gleichung (III.8) sind bereits durch (III.1b) gegeben.

Die noch fehlenden zwei Bedingungen ergeben sich aus einer Betrachtung der Differentialgleichungen (II.24) am Rande. Wir haben bei der Überführung dieser Gleichun-

gen in Differentialgleichungen stillschweigend vorausgesetzt, daß der betrachtete Gitterpunkt N innerer Punkt des Gitters ist, indem wir nämlich über alle 6 Nachbarpunkte $N+E_k$ summiert haben. Gemäß Gleichung (I.12) ist bei Randpunkten jedoch nur über die vorhandenen Nachbarpunkte zu summieren. Sollen die Differenzengleichungen daher auch am Rande erfüllt sein, so müssen die Beiträge der fehlenden Nachbarpunkte für sich verschwinden.

Dies gibt für jede der beiden Gleichungen (II.24) eine zusätzliche Bedingung (siehe Anhang V).

Aus Gleichung (II.24a) erhält man

$$\tilde{w}'(R) + 2 v'(R) + \frac{2}{R} \tilde{w}(R) = 0 \quad (\text{III. 9a})$$

und aus (II.24b)

$$v'(R) + 2 \tilde{w}'(R) = 0 \quad (\text{III. 9b})$$

wobei die Begrenzung des Kristalls einfachheitshalber als kreisförmig mit dem Radius R angenommen wurde.

Es läßt sich leicht verifizieren, daß die Lösung

$$\tilde{w}(r) = \left(\frac{\beta}{r^2} - \frac{4}{9a^2} \right) r^2 \quad \text{für } r \leq r_0 \quad (\text{III. 10a})$$

$$v(r) = -\beta \left(2 - \frac{r^2}{R^2} + 4 \ln \frac{r}{r_0} \right) \quad \text{für } r \geq r_0.$$

und

$$\tilde{w}(r) = \left(\frac{\beta}{2R^2} - \frac{1}{9a^2} \right) r^2 \quad \text{für } r \leq r_0. \quad (\text{III.10b})$$

$$\tilde{w}(r) = \beta \left(1 + \frac{r}{2R^2} - \frac{1}{2} \frac{r_0^2}{r^2} \right) \quad \text{für } r \geq r_0.$$

mit
$$\beta = \frac{1}{3\sqrt{3}\pi}. \quad (\text{III.11})$$

die Differentialgleichung (III.7), die Nebenbedingungen (III.1b) sowie die Randbedingungen (III.9) erfüllt, und außerdem der Stetigkeitsforderung für v , $\tilde{w}$ und deren ersten Ableitungen an der Stelle $r=r_0$ genügt.

Für die Abstandsschwankungen zwischen zwei Gitterteilchen in den Positionen 0 und N gemäß Formel (I.21) und (II.17) ergibt sich dann folgender Näherungs Ausdruck:

(r steht für den Gleichgewichtsabstand der beiden Gitterteilchen $r = \hat{r}_N$).

$$\overline{\delta r_{N0}^2} = - \frac{2KT}{M\omega_0^2} \left[v(r) + \tilde{w}(r) \right] \quad (\text{III.12})$$

Dabei ist berücksichtigt, daß unsere kontinuierlichen Lösungen (III.10) bereits so normiert sind, daß v und $\tilde{w}$ am Koordinatenursprung gleich 0 sind, ferner, daß gemäß Gleichung (III.5b)

$$\frac{z_N}{z_N} w(r, \phi) = \exp(-2i\phi) \tilde{w}(r) \exp(2i\phi) = \tilde{w}(r).$$

ist, und schließlich, daß infolge der Symmetrieeigenschaften (siehe Gleichung II.18 bis II.21) $v(r)$ und $\tilde{w}(r)$ reell sind. Im Grenzfall $R \rightarrow \infty$ erhält man dann explizit:

$$\overline{\delta r_{N0}^2} = \frac{2KT}{M\omega_0^2} \beta \left(1 + \frac{1}{2} \frac{r_0^2}{r^2} + 4 \ln \frac{r}{r_0} \right) \quad (\text{III.13})$$

Inwieweit dieser Ausdruck geeignet ist, die tatsächlichen Abstandsschwankungen in unserem Modellgitter darzustellen, soll im folgenden Abschnitt näher untersucht werden.

Außerdem werden noch die Ergebnisse von Frenkel diskutiert und mit unseren verglichen.

IV. Diskussion der mit dem Übergang zur kontinuierlichen Beschreibung verbundenen Fehler.
Vergleich mit den Ergebnissen von Frenkel.

Um abzuschätzen, wie groß die Fehler sind, die durch den Übergang von den Differenzengleichungen (II.24) zu den Differentialgleichungen (III.4) entstehen, wurden die Differenzengleichungen für einen endlichen Kristall (bestehend aus 169 Gitterteilchen) mit Hilfe eines Computerprogramms exakt gelöst.

Die Ergebnisse ($v_0, \tilde{\omega}_0$) sind in Tabelle 1 aufgeführt und in Abbildung 1 mit den entsprechenden Lösungen der Differentialgleichungen (siehe Gleichung III.10) verglichen. Aus der Abbildung ist zu ersehen, daß die kontinuierliche Lösung in der Nähe des Nullpunktes nicht allzu gut ist, wie zu erwarten war, aber für große r in die diskrete Lösung übergeht. Von dem dritten Nachbarn ab ($r \geq 3a$) unterscheiden sich die beiden Lösungen höchstens noch um 1 %.

Deshalb wird man ermutigt, nach dem dritten Nachbarn, zur Berechnung der Abstandsschwankungen, die kontinuierliche Lösung zu verwenden.

Für die Berechnung des ersten und zweiten Nachbarn größerer Kristalle kann man die für die aus 169 Atomen errechneten diskreten Werte deshalb als gute Näherung ansehen, weil das von R abhängige Glied der kontinuierlichen Lösung (III.10) weniger als 1 % beträgt. Bei sehr kleinen Kristallen muß die diskrete Lösung aufgesucht werden.

Wir wollen als nächstes die Frage untersuchen, in welcher Beziehung die Ergebnisse der in der Einleitung erwähnten "Frenkel'schen Methode" zu unseren stehen.

T a b e l l e 1

n,m	r	$\nu_0(N)$	$\omega_0(N)$	$\nu_0(N) + \tilde{\omega}_0(N)$
1,0	1,000	-0,4047	0,0733	-0,3314
1,1	1,732	-0,4612	0,0614	-0,3998
2,0	2,000	-0,4770	0,0614,	-0,4156
2,1	2,646	-0,5334	0,0623	-0,4711
3,0	3,000	-0,5583	0,0648	-0,4935
2,2	3,464	-0,5882	0,0659	-0,5223
3,1	3,606	-0,6010	0,0678	-0,5332
4,0	4,000	-0,6272	0,0683	-0,5589
3,2	4,359	-0,6456	0,0673	-0,5783
4,1	4,583	-0,6580	0,0670	-0,5910
5,0	5,000	-0,6712	0,0674	-0,6038
3,3	5,196	-0,6839	0,0681	-0,6158
4,2	5,292	-0,6915	0,0685	-0,6230
5,1	5,568	-0,7077	0,0680	-0,6397
6,0	6,000	-0,7125	0,0675	-0,6450
4,3	6,083	-0,7190	0,0669	-0,6521
5,2	6,245	-0,7410	0,0669	-0,6750
6,1	6,557	-0,7464	0,0689	-0,6775
7,0	7,000	-0,7710	0,0702	-0,7008

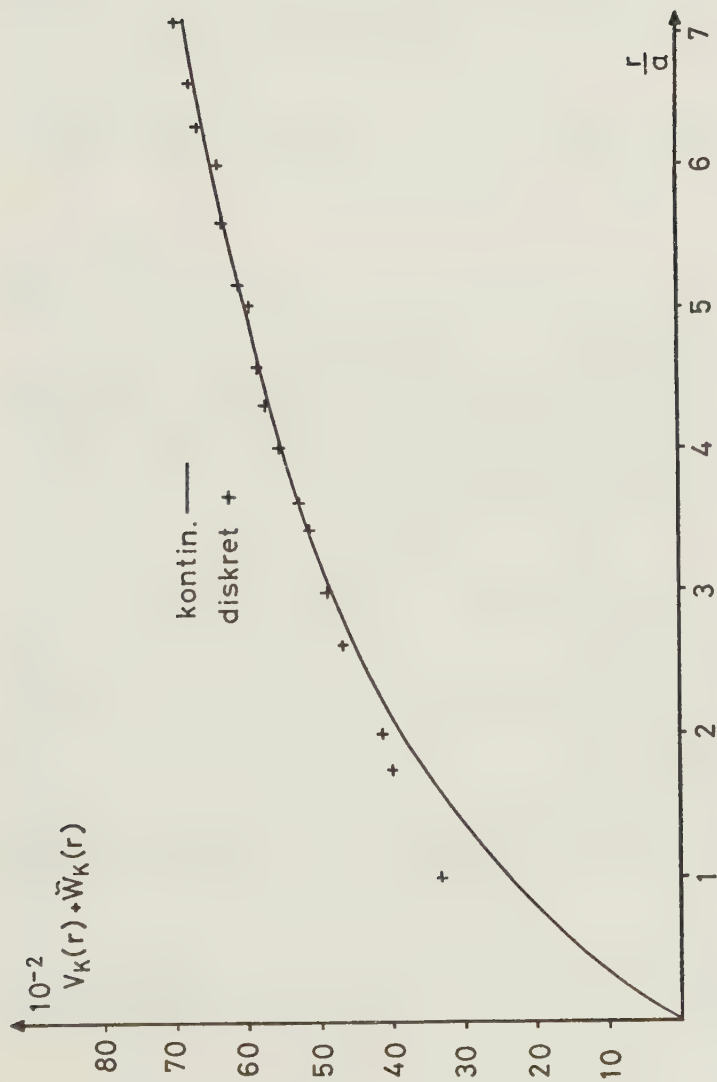


Abb. 1 Vergleich der kontinuierlichen und diskreten Lösung

Das übliche Verfahren, die mittleren Abstandsschwankungen von Gitterteilchen zu berechnen, geht von der Annahme aus, daß sich die Bewegung der Gitterteilchen durch eine Superposition elastischer Wellen darstellen läßt:

$$\vec{u}(N) = \frac{N_0}{(2\pi)^2} v_E \sum_j \int_{\text{Bril. Z.}} d\nu_q A_{qj} \vec{e}_{qj} \cos(\vec{q} \cdot \vec{r}_N - \omega_{qj} t) \quad (\text{IV.1})$$

Dabei ist

N_0 die Anzahl der Gitterteilchen

v_E das Volumen einer Elementarzelle ($v_E = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2$).

A_{qj} und $\vec{e}_{qj}$ bezeichnen die Amplitude und den Polarisationsvektor der Schwingung des j-ten Modes ($j=1,2$) der elastischen Welle des Wellenvektors $\vec{q}$.

Für den thermischen Mittelwert der Größe

$$\overline{\Delta r_{N0}^2} = \left[\frac{\vec{r}_N^0}{\vec{r}_N} (\vec{u}(N) - \vec{u}(0)) \right] \quad (\text{IV.2})$$

(siehe Gleichung (I.17)) erhält man dann bei Anwendung der klassischen Statistik (Grenzfall hoher Temperaturen) den Ausdruck

$$\overline{\Delta r_{N0}^2} = \frac{2kT}{M(2\pi)^2} v_E \sum_j \int_{\text{Bril. Z.}} d\nu_q \left(\frac{\vec{r}_N^0}{\vec{r}_N} \cdot \vec{e}_{qj} \right)^2 \frac{1}{\omega_{qj}^2} (1 - \cos \vec{q} \cdot (\vec{r}_N - \vec{r}_0)) \quad (\text{IV.3})$$

Eine praktische Auswertung dieses Ausdruckes ist bisher nur unter ziemlich einschneidender Näherungsannahmen durchgeführt worden (Peierls, Frenkel, Keating u. Walker). Wir wollen im Folgenden unsere Ergebnisse mit denen Frenkels vergleichen, die aus der Formel (IV.3) unter folgender Annahme zu erhalten sind:

1.) Hinsichtlich des Frequenzspektrums wird die Näherung

$$\omega_{\vec{q}} = v_s |\vec{q}| \quad (\text{IV. 4})$$

zugrundegelegt, wobei die Schallgeschwindigkeit v_s unabhängig von der Wellenzahl $\vec{q}$ ist.

2.) Die Brillouinzone wird durch einen Kreis approximiert, dessen Radius $q_{\max}$ sich aus der Beziehung

$$\pi q_{\max}^2 = \frac{(2\pi)^2}{v_E} = \frac{(2\pi)^2}{a^2} \frac{2}{\sqrt{3}} \quad (\text{IV. 5a})$$

ergibt, woraus mit Hilfe von (III.3)

$$q_{\max} = \frac{2}{v_0} \quad (\text{IV. 5b})$$

folgt.

Unter diesen beiden Bedingungen ergibt sich aus Gleichung (IV.3)

$$\overline{\epsilon}_{r_{v_0}} = \frac{4kT}{m v_s^2} \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2/a_0} \frac{\sin^2\left(\frac{qr}{2} \cos \varphi\right)}{q} dq d\varphi \quad (\text{IV. 6})$$

3.) Für die weitere Auswertung dieses Integrals wird noch eine Näherung gemacht, nämlich

$$\int_0^{2\pi} \sin^2 \left(\frac{q\gamma}{2} \cos \varphi \right) d\varphi = \frac{2\pi}{2} \left(\frac{1}{2} q\gamma^2 \right) \quad \text{für } \frac{q\gamma}{2} < \frac{\pi}{2}$$

$$\int_0^{2\pi} \sin^2 \left(\frac{q\gamma}{2} \cos \varphi \right) d\varphi = \frac{2\pi}{2} \quad \text{für } \frac{q\gamma}{2} > \frac{\pi}{2}$$

(IV. 7)

gesetzt. Damit erhält man schließlich *:

$$\left(\overline{\mathcal{S}_{\gamma_{N_0}^2}} \right)_{FV} = \frac{kT}{M v_0^2} \frac{\sqrt{3}}{2\pi} a^2 \left[\frac{\pi^2}{8} + \ln \frac{2}{\pi} + \ln \frac{\gamma}{\gamma_0} \right] \quad (\text{IV. 8})$$

Für die Abstandsschwankungen nach unserer Methode erhält man mit Hilfe der Gleichungen (II.17) und (III.10) für den Fall eines großen Kristalls, d.h. $R \rightarrow \infty$, den Ausdruck (siehe Gleichung III.13)

$$\left(\overline{\mathcal{S}_{\gamma_{N_0}^2}} \right)_{TS} = \frac{kT}{M \omega_0^2} \frac{8}{3\sqrt{3}\pi} \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{8} \frac{\gamma_0^2}{\gamma^2} + \ln \frac{\gamma}{\gamma_0} \right) \quad (\text{IV. 9})$$

Ein Vergleich der Ergebnisse dieser beiden Methoden ist eigentlich nur möglich, falls zwischen der in der Gleichung

*) Zu dem zitierten Buch [7] von Frenkel findet man auf S. 149 allerdings eine Lösung, die sich von (IV.8) um den Faktor 2π unterscheidet.

chung (IV.8) auftretenden "Schallgeschwindigkeit" v_s und in unserem (IV.9) ω_0 eine eindeutige Beziehung hergestellt werden kann. In Anhang VI ist das Frequenzspektrum für unser Modell berechnet worden. Dabei ergeben sich (im Grenzfall $\vec{q} \rightarrow 0$) zwei verschiedene Schallgeschwindigkeiten für transversale und longitudinale Wellen, nämlich

$$v_t = \sqrt{\frac{3}{8}} \omega_0 a \quad (\text{IV.10a})$$

$$v_l = \sqrt{\frac{9}{8}} \omega_0 a. \quad (\text{IV.10b})$$

v_t und v_l unterscheiden sich also um den Faktor $\sqrt{3}$. D.h., die Annahme Frenkels hinsichtlich des Frequenzspektrums (siehe Gleichung IV.4) ist keineswegs erfüllt. Will man trotzdem einen Vergleich vornehmen, so erscheint es, wie allgemein üblich, am sinnvollsten, die in Gleichung (IV.8) auftretende Größe $\frac{1}{v_s^2}$ durch den Mittelwert

$$\left\langle \frac{1}{v_s^2} \right\rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_t^2} + \frac{1}{v_l^2} \right) = \frac{16}{9} \frac{1}{\omega_0^2 a^2} \quad (\text{IV.11})$$

zu ersetzen. Man erhält dann für Gleichung (IV.8) den Ausdruck:

$$\overline{(\delta r_{w0}^2)} = \frac{kT}{M\omega_0^2} \frac{8}{3\sqrt{3}\pi} \left(\frac{\pi^2}{8} + \ln \frac{2}{\pi} + \ln \frac{r}{r_0} \right) \quad (\text{IV.12})$$

Erstaunlicherweise stimmt der Faktor vor der Klammer, d.h. der Faktor, des für groß r dominierenden logarithmischen Gliedes ($\ln \frac{\gamma}{\gamma_0}$), mit der korrigierten Frenkelschen Formel (IV.9) genau überein.

Das asymptotische Verhalten der Abstandsschwankungen ist also in beiden Fällen das gleiche, während sich diese Größe für nahe benachbarte Atome unterscheidet (etwa um den Faktor 1,2). In Abbildung 2 ist das Verhältnis der beiden Größen als Funktion des Abstandes $\frac{\gamma}{a}$ dargestellt.

Abschließend kann man sagen, daß bei der von uns verwendeten Methode weniger willkürlich Näherungsannahmen notwendig sind als bei der "Frenkelschen" (siehe Seite 33,34). Insbesondere ist die Kenntnis des Frequenzspektrums dabei nicht Vorbedingung für die Ermittlung der Abstandsschwankungen.

Außerdem ermutigt uns die recht gute Übereinstimmung der kontinuierlichen Lösung mit der diskreten und die fehlenden Näherungsannahmen von Frenkel zu behaupten, daß der Weg, der in der vorliegenden Arbeit beschritten wurde die richtigen Resultate zur Berechnung der Abstandsschwankungen liefert.

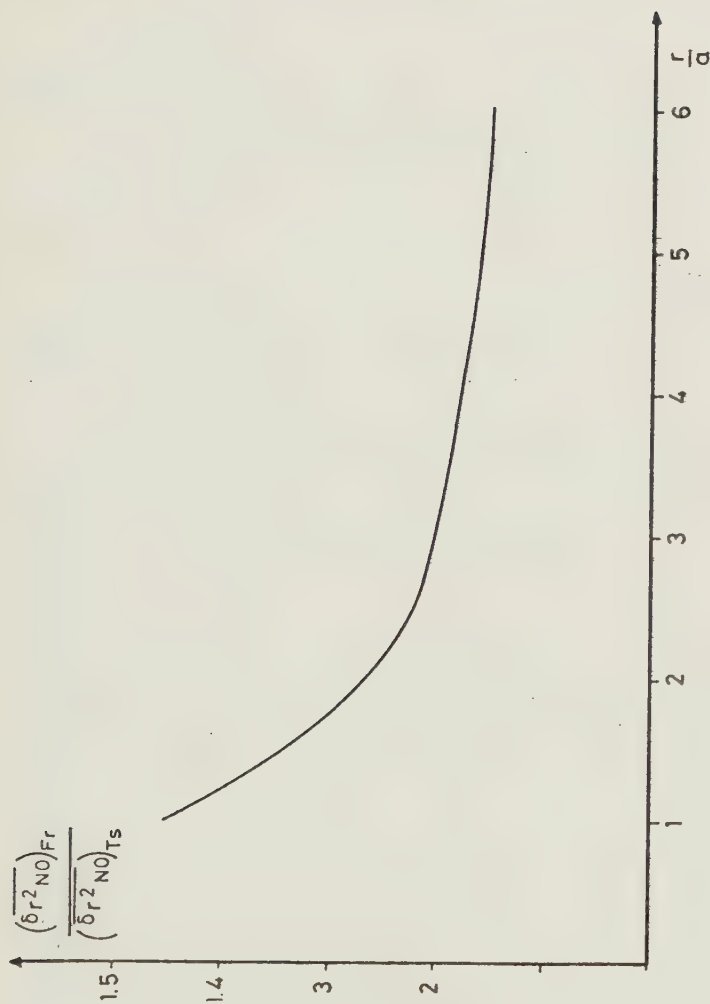


Abb. 2 Das Verhältnis der Abstandsschwankungen der beiden Methoden als Funktion des Abstandes $\frac{r}{a}$

- A N H A N G I -

Nennen wir ϕ_v ein Eigenvektor zu der Matrix C , (siehe Gleichung (I.12)), mit dem Eigenwert c_v , d.h.

$$C \phi_v = c_v \phi_v \quad (\text{A I.1})$$

und gleichfalls

$$C \phi_r = c_r \phi_r \quad (\text{A I.2})$$

so können wir ein vollständiges, orthogonales und normiertes System von Eigenvektoren erhalten, nämlich

$$\phi_v^+ \phi_r = \delta_{vr} \quad (\text{A I.3a})$$

$$\text{und} \quad \sum_v \phi_v \phi_v^+ = 1 \quad (\text{A I.3b})$$

Für die weiteren Berechnungen ist es zweckmäßig, die potentielle Energie (siehe Gleichung (I.7)) auf Hauptachsen zu transformieren. Dazu führt man neue Koordinaten v_v ein,

$$v_v = \phi_v^+ u \quad \text{mit} \quad u = \sum_v v_v \phi_v \quad (\text{A I.4})$$

Setzen wir die neuen Koordinaten in den Ausdruck (I.7)

für die potentielle Energie ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} u^+ C u &= \frac{1}{2} \sum_{v,r} v_v v_r^* (\phi_r^+ C \phi_v) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{v,r} v_v v_r^* (c_v \delta_{vr}) = \frac{1}{2} \sum_v c_v v_v^2 \end{aligned} \quad (\text{A I.5})$$

Die potentielle Energie ist also auf Hauptachsen transformiert. Aus Gleichung (I.21) erhält man mit Hilfe der neuen Koordinaten

$$\overline{u^+ A_{n0} u} = \sum_{\nu, \mu} \overline{v_\nu v_\mu^*} (\phi_\nu^+ A_{n0} \phi_\mu) \quad (\text{A I.6})$$

Nach der Boltzmanverteilung und Gleichung (A I.5) erhält man

$$\overline{v_\nu v_\mu^*} = \frac{\int v_\nu v_\mu^* e^{-\frac{1}{2} c_\nu v_\nu^2 / kT} dv_\nu}{\int e^{-\frac{1}{2} c_\nu v_\nu^2 / kT} dv_\nu} = \frac{kT}{c_\nu} \delta_{\nu\mu} \quad (\text{A I.6a})$$

sofern $c_\nu \neq 0$ ist.

Nennen wir $\overset{\circ}{\phi}_\nu$ ein Nullvektor von C zum Eigenwert $c_\nu = 0$

$$C \overset{\circ}{\phi}_\nu = 0 \quad (\text{A I.7})$$

und setzen wir voraus, daß die Bedingung

$$\overset{\circ}{\phi}_\nu^+ A_{n0} \overset{\circ}{\phi}_\nu = 0 \quad (\text{A I.8})$$

gilt, (Diese Bedingung wird im Anhang II explizit nachgewiesen), so erhält man aus Gleichung (A I.6)

$$\overline{u^+ A_{n0} u} = kT \sum_\nu ' c_\nu^{-1} (\phi_\nu^+ A_{n0} \phi_\nu) \quad (\text{A I.9})$$

wobei der Strich über der Summe bedeutet, daß für solche v summiert werden soll, bei denen $c_v \neq 0$ ist.

Definieren wir

$$C^{-1} = \sum_v' c_v^{-1} \phi_v \phi_v^+ \quad (\text{A I.10})$$

so erhält man aus Gleichung (A I.9)

$$\begin{aligned} u^+ A_{N_0} u &= \kappa_T \sum_v' c_v^{-1} (\phi_v^+ A_{N_0} \phi_v) = \\ &= \kappa_T \sum_v' (\phi_v A_{N_0} C^{-1} \phi_v) = \kappa_T \text{Spur} (A_{N_0} C^{-1}) \end{aligned}$$

d.h. wir erhalten Gleichung (I.25) .

Die Matrix C^{-1} ist wie man leicht sieht aus (A. I.10) : symmetrisch.

Die Matrix $C^{-1} = Y$ ist eindeutig, denn nehmen wir an, es gäbe ein Y' , so daß nach Gleichung (I.27)

$$C Y' = 1 - P_0 \quad (\text{A I.11a})$$

$$\text{und} \quad P_0 Y' = 0 \quad (\text{A I.11b})$$

gilt. Dann erhalten wir mit Gleichungen (A I.11) und (I.27)

$$C (Y - Y') = 0 \quad (\text{A I.12a})$$

$$\text{und} \quad P_0 (Y - Y') \quad (\text{A I.12b})$$

Multiplizieren wir Gleichung (A I.12a) von links mit ϕ_v^+ ,
so erhalten wir

$$c_v \phi_v^+ (\gamma - \gamma') = 0 \quad (\text{A I.13})$$

und da $c_v \neq 0$

$$\phi_v^+ (\gamma - \gamma') = 0 \quad (\text{A I.14})$$

Durch Linksmultiplikation mit ϕ_v und Summation über $\sum_v'$ erhält man aus Gleichung (A I.14)

$$\sum_v' \phi_v \phi_v^+ (\gamma - \gamma') = 0$$

Hieraus folgt mit Hilfe (A I.12b)

$$\gamma = \gamma' \quad (\text{A I.15})$$

denn es gilt die Gleichung

$$\sum_v' \phi_v \phi_v^+ = 1 - p_0$$

Also ist die Matrix C^{-1} eindeutig.

- A N H A N G II -

Einführung der "Nullvektoren".

Wir definieren einen Nullvektor $\vec{\Phi}_\nu$ dadurch, daß folgende Beziehung gilt,

$$C \vec{\Phi}_\nu = 0 \quad (\text{A II.1})$$

das bedeutet, ein Nullvektor ist dadurch charakterisiert, daß er Eigenvektor von C zum Eigenwert Null ist.

Wir haben folgende Nullvektoren

$$\vec{\Phi}_\pm = \Gamma \sum_N e_\pm(N) \quad (\text{A II.2})$$

$$\text{und } \vec{\Phi}_\nu = \Gamma_\nu \sum_N (z_N e_-(N) - z_N^* e_+(N)) \quad (\text{A II.3})$$

wobei
$$e_\pm(N) = \frac{1}{\sqrt{2}} (e_0(N) \pm i e_y(N))$$

$$z_N = n + m \cdot \exp(i \frac{\eta}{3})$$

$$\Gamma^{-1} = \sqrt{\sum_N 1}$$

und

$$\Gamma_\nu^{-1} = \sqrt{2} \sqrt{\sum_N |z_N|^2}$$

bedeuten.

Auf Grund der Definition (A II.1) müssen dann folgende Beziehungen gelten:

$$\begin{aligned} \langle \overset{\circ}{\phi}_{\pm} &= \\ &= \frac{M\omega_c^2}{2} \sum_{N, k} \left[e_k(N+E_k) - e_k(N) \right] \left[e_k^+(N+E_k) - e_k^+(N) \right] \Gamma \sum_{N'} e_{\pm}(N') = 0 \end{aligned} \quad (\text{A II.4})$$

Zwischen $e_k^+(N)$ und $e_{\pm}(N)$ gilt folgende einfache Beziehung:

$$e_k^+(N') e_{\pm}(N) = \frac{\exp\left(\pm i \frac{\pi}{3} k\right)}{\sqrt{2}} \delta_{NN'} \quad (\text{A II.5})$$

Hiermit erhalten wir aus Gleichung (A II.4)

$$\langle \overset{\circ}{\phi}_{\pm} = \frac{M\omega_c^2}{2} \Gamma \sum_{k, N, N'} \left[e_k(N+E_k) - e_k(N) \right] \left[\delta_{N+E_k, N'} - \delta_{NN'} \right] \frac{\exp\left(\pm i \frac{\pi}{3} k\right)}{\sqrt{2}}$$

Führen wir die Summation über N' aus, so erhalten wir leicht, daß

$$\langle \overset{\circ}{\phi}_{\pm} = 0 \quad (\text{A II.6a})$$

ist.

Ganz analog erhalten wir

$$\langle \overset{\circ}{\phi}_r = 0 \quad (\text{A II.6b})$$

Hiermit ist bewiesen, daß $\overset{\circ}{\phi}_r, \overset{\circ}{\phi}_{\pm}$ Nullvektoren sind.

Wir untersuchen jetzt die Bedingung,

$$\dot{\Phi}_V A_{N0} \dot{\Phi}_V = 0 \quad (\text{AII.7})$$

(die wir in Anhang I, Gleichung (A I.8) gestellt haben),
mit A_{N0} aus Gleichung (I. 22) und $\dot{\Phi}_V$ aus (A II.2)
und (A II.3).

Wir erhalten

$$\begin{aligned} \dot{\Phi}_\pm^\dagger A_{N0} \dot{\Phi}_\pm &\sim \sum_M e_\pm^\dagger(M) (e_{nm}(N) - e_{nm}(0)) (e_{nm}^\dagger(N) - e_{nm}^\dagger(0)) \sum_{M'} e_\pm(M') \\ &= \sum_M (\delta_{MN} e_\pm^\dagger(M) e_{nm}(N) - e_\pm^\dagger(M) e_{nm}(0) \delta_{M0}) \sum_{M'} (e_{nm}^\dagger(N) - e_{nm}^\dagger(0)) e_\pm(M') \\ &= \left[e_\pm^\dagger(N) e_{nm}(N) - e_\pm^\dagger(0) e_{nm}(0) \right] \sum_{M'} (e_{nm}^\dagger(N) - e_{nm}^\dagger(0)) e_\pm(M') \end{aligned} \quad (\text{AII.8})$$

Aus

$$\begin{aligned} e_\pm^\dagger(N) e_{nm}(N) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (e_o^\dagger(N) \mp i e_y^\dagger(0)) \sqrt{\frac{(n e_o(N) + m e_1(N))}{n^2 + nm + m^2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{1}{n^2 + nm + m^2}} \left(n + \frac{m}{2} \mp i \frac{\sqrt{3}}{2} m \right) \end{aligned}$$

erhalten wir aber, daß $e_\pm^\dagger(N) e_{nm}(N)$ von N unabhängig ist,
und folglich gilt die Beziehung

$$e_\pm^\dagger(N) e_{nm}(N) = e_\pm^\dagger(0) e_{nm}(0). \quad (\text{AII.9})$$

Mit Gleichung (AII9) erhält man aus (A II.8)

$$\dot{\Phi}_\pm^\dagger A_{N0} \dot{\Phi}_\pm = 0 \quad (\text{A II.10})$$

Auf ähnliche Weise erhält man auch:

$$\overset{\circ}{\Phi}_+^\dagger A_{\omega_0} \overset{\circ}{\Phi}_+ = 0 \quad (\text{A II.11})$$

Bei der Aufstellung der Differenzengleichungen müssen wir den Ausdruck

$$P_0 e_+(0)$$

berechnen. P_0 bedeutet den Projektionsoperator auf den Teilraum der Eigenvektoren zum Eigenwert Null.

$$P_0 = \sum_N \left[\overset{\circ}{\Phi}_+^\dagger(N) \overset{\circ}{\Phi}_+^\dagger(N) + \overset{\circ}{\Phi}_-(N) \overset{\circ}{\Phi}_-^\dagger(N) + \overset{\circ}{\Phi}_+(N) \overset{\circ}{\Phi}_+^\dagger(N) \right]$$

Es ist dann, mit Gleichung (A II.2) bzw. (A II.3)

$$P_0 e_+(0) = \left[\Gamma^2 \sum_N e_+(N) \sum_{N'} e_+^\dagger(N') + \Gamma^2 \sum_N e_-(N) \sum_{N'} e_-^\dagger(N') + \right.$$

$$\left. + \Gamma^2 \sum_N (z_N e_-(N) - z_N^* e_+(N)) \sum_{N'} (z_{N'} e_-(N') - z_{N'}^* e_+(N')) \right] e_+(0).$$

$$= \Gamma^2 \sum_N e_+(N) - \Gamma^2 \sum_N (z_N e_-(N) - z_N^* e_+(N)) \sum_{N'} z_{N'}^{**} \delta_{N',0} = \Gamma^2 \sum_N e_+(N)$$

denn es gilt:

$$\sum_N z_{N'}^{**} \delta_{N',0} = z_0^{**} = 0.$$

Man erhält also:

$$P_0 e_+(0) = \Gamma^2 \sum_N e_+(N). \quad (\text{A III.2})$$

Wir untersuchen jetzt die Bedeutung der Nebenbedingung
(siehe Gleichung (II.25a))

$$P_0 \varphi_+ = 0 \quad (\text{A II.13})$$

Es ist nach (A II.2) und (A II.3)

$$P_0 = \sum_N \left[\dot{\phi}_+^{\circ}(N) \dot{\phi}_+^{\dagger}(N) + \dot{\phi}_-^{\circ}(N) \dot{\phi}_-^{\dagger}(N) + \dot{\phi}_v^{\circ}(N) \dot{\phi}_v^{\dagger}(N) \right] \quad (\text{A II.14})$$

Entwickeln wir φ_+ nach der Basis $e_{\pm}(N)$ und berücksichtigen wir Gleichung (II.16), so erhalten wir

$$\begin{aligned} \varphi_+ &= \sum_N \left[e_+(N) e_+^{\dagger}(N) + e_-(N) e_-^{\dagger}(N) \right] \varphi_+ = \\ &= \sum_N \left[v(N) e_+(N) + w(N) e_-(N) \right] \end{aligned} \quad (\text{A II.15})$$

Somit erhalten wir

$$P_0 \varphi_+ = \sum_N \left[\dot{\phi}_+^{\circ} \dot{\phi}_+^{\dagger} + \dot{\phi}_-^{\circ} \dot{\phi}_-^{\dagger} + \dot{\phi}_v^{\circ} \dot{\phi}_v^{\dagger} \right] \varphi_+ = 0 \quad (\text{A II.16})$$

Für den Ausdruck $\sum_N \dot{\phi}_+^{\circ} \dot{\phi}_+^{\dagger} \varphi_+$ mit Gleichung (A II.2) und (A II.3) erhält man

$$\begin{aligned} \sum_N \dot{\phi}_+^{\circ} \dot{\phi}_+^{\dagger} \varphi_+ &= \Gamma^2 \sum_N e_+(N) \sum_{N'} e_+^{\dagger}(N') \sum_{N''} \left[v(N'') e_+(N'') + w(N'') e_-(N'') \right] = \\ &= \Gamma^2 \sum_N e_+(N) \sum_{N'} \sum_{N''} v(N'') \delta_{N' N''} = \Gamma^2 \sum_N e_+(N) \sum_{N'} v(N') \end{aligned} \quad (\text{A II.17})$$

Für den Term $\sum_N \ddot{\phi}_- \ddot{\phi}_+^* \varphi_i$ erhält man:

$$\sum_N \ddot{\phi}_- \ddot{\phi}_+^* \varphi_i = \Gamma^2 \sum_N e_-(N) \sum_{N'} e_+^*(N') \sum_{N''} \left[v(N'') e_+(N'') + w(N'') e_-(N'') \right] \quad (\text{A II.18})$$

$$= \Gamma^2 \sum_N e_-(N) \sum_{N'} \sum_{N''} w(N'') \delta_{N', N''} = \Gamma^2 \sum_N e_-(N) \sum_{N'} w(N').$$

und für

$$\sum_N \ddot{\phi}_v \ddot{\phi}_v^* \varphi_i = \Gamma_v^2 \left[\sum_N (z_N e_-(N) - z_N^* e_+(N)) \sum_{N'} (z_N^* e_-^*(N') - z_N e_+^*(N')) \right. \\ \left. + \sum_{N''} (v(N'') e_+(N'') + w(N'') e_-(N'')) \right] = \Gamma_v^2 \left[\sum_N (z_N e_- - z_N^* e_+) \sum_{N'} (z_N^* w - z_N v) \right]$$

Auf Grund der Beziehung von $w(0N) = e^{2i\frac{\pi}{3}} w(N)$ (siehe Gleichung II.19), erhält man

$$\sum_N z_N^* w(N) = \sum_N w(0N) z_{0N}^* = \sum_N w(N) e^{2i\frac{\pi}{3}} e^{-2i\frac{\pi}{3}} z_N^* = \\ = e^{2i\frac{\pi}{3}} \sum_N w(N) z_N^*$$

Hieraus folgt:

$$\sum_N w(N) z_N^* = 0$$

Auf ähnliche Weise erhält man

$$\sum_N v(N) z_N = 0$$

so daß

$$\sum_N \ddot{\phi}_v(N) \ddot{\phi}_v^*(N) \varphi_i = 0 \quad (\text{A II.19})$$

gilt.

Mit Gleichungen (A II.17), (A II.18) und (A II.19 erhält man aus (A II.16)

$$p_0 \varphi_j = r^2 \left[\sum_n e_+(n) \sum_{n'} v(n') + \sum_n e_-(n) \sum_{n'} w(n') \right] = 0$$

Da $e_{\pm}(n)$ linear unabhängig sind, erhält man als äquivalent für die Nebenbedingung den Ausdruck

$$\sum_n v(n) = 0 \quad (\text{A II.20})$$

und $\sum_n w(n) = 0. \quad (\text{A II.21}).$

- A N H A N G III -

Wir stellen uns die Frage, ob C^{-1} mit T vertauschbar ist.

Nach Gleichung (II.4) gilt die Vertauschbarkeitsrelation

$$C T = T C \quad (\text{A III.1})$$

Wir können die Matrix C folgendermaßen darstellen:

$$C = \sum_{\nu} c_{\nu} \phi_{\nu} \phi'_{\nu} = \sum_{\nu} c_{\nu} P_{\nu} \quad (\text{A III.2})$$

P_{ν} ist der Projektionsoperator im Raum der Eigenvektoren von C . Auf ähnliche Weise schreiben wir C^{-1}

$$C^{-1} = \sum_{\nu} c'_{\nu} P_{\nu} \quad c_{\nu} \neq 0 \quad (\text{A III.3})$$

Der Strich bedeutet, daß wir für solche ν summieren wollen, bei denen $c_{\nu} \neq 0$ ist.

Aus Gleichung (A III.1) und (A III.2) bekommen wir

$$\sum_{\nu} c_{\nu} (P_{\nu} T - T P_{\nu}) = 0 \quad (\text{A III.4})$$

Um die Frage nach der Vertauschbarkeit zwischen C^{-1} und T zu beantworten, müssen wir untersuchen, ob P_{ν} mit T vertauschbar ist.

Aus Gleichung (A III.4) erhalten wir durch Linksmultiplikation mit P_{β} folgenden Ausdruck:

$$\sum_{\nu} c_{\nu} (P_{\beta} P_{\nu} T - P_{\beta} T P_{\nu}) = 0$$

Es gilt aber die Beziehung $\beta_\nu = P_\nu \delta_{\nu\lambda}$, da für den Projektionsoperator P_ν $P_\nu^2 = P_\nu$ gilt.

Hiermit erhalten wir aus dem vorigen Ausdruck

$$\sum_\nu c_\nu \delta_{\nu\lambda} P_\nu T = \sum_\nu c_\nu \beta_\lambda T P_\nu$$

oder

$$c_\lambda \beta_\lambda T = \sum_\nu c_\nu \beta_\lambda T P_\nu$$

Durch Rechtsmultiplikation mit P_μ erhalten wir

$$c_\lambda \beta_\lambda T P_\mu = \sum_\nu c_\nu \beta_\lambda T \delta_{\nu\mu} P_\mu = c_\mu \beta_\lambda T P_\mu$$

$$(c_\lambda - c_\mu) \beta_\lambda T P_\mu = 0 \quad (\text{A III.5})$$

Falls $c_\lambda \neq c_\mu$ erhält man

$$\beta_\lambda T P_\mu = 0 \quad (\text{A III.6})$$

Summieren wir über μ , so erhalten wir

$$\sum_\mu \beta_\lambda T P_\mu = \beta_\lambda T = \beta_\lambda T \beta_\lambda + \sum_{\mu \neq \lambda} P_\mu T \beta_\lambda = \beta_\lambda T \beta_\lambda$$

also

$$\beta_\lambda T = \beta_\lambda T \beta_\lambda \quad (\text{A III.7})$$

Da Gleichung (A III.6) symmetrisch in μ und λ ist, erhalten wir

$$\sum_\mu P_\mu T \beta_\lambda = T \beta_\lambda = \beta_\lambda T \beta_\lambda + \sum_{\mu \neq \lambda} P_\mu T \beta_\lambda = \beta_\lambda T \beta_\lambda$$

also

$$T \beta_\lambda = \beta_\lambda T \beta_\lambda \quad (\text{A III.8})$$

Aus Gleichung (A III.7) und (A III.8) bekommen wir die Vertauschungsrelation

$$P_j T - T P_j = 0 \quad (\text{A III.9})$$

Da

$$C^{-1} T - T C^{-1} = \sum_v C_v^{-1} (P_v T - T P_v) \quad (\text{A III.10})$$

gilt, erhalten wir mit der Beziehung (A III.9) die Vertauschbarkeit von C^{-1} mit T , nämlich

$$C^{-1} T - T C^{-1} = 0 \quad (\text{A III.11}).$$

- A N H A N G IV -

Wir werden die Matrix C in die Basis $e_{\pm}(n)$ umschreiben. Dazu müssen wir die $e_k(n)$ durch die $e_{\pm}(n)$ ausdrücken. Nach Gleichung (I.12) gilt:

$$C = \frac{M\omega_0^2}{2} \sum_n \sum_{k=0}^5 [e_k(n+E_k) - e_k(n)] [e_k^\dagger(n+E_k) - e_k^\dagger(n)] \quad (\text{AIV.1})$$

Wir multiplizieren C von links und rechts mit dem Einheitsoperator

$$I = \sum_{n'} [e_+(n') e_+^\dagger(n') + e_-(n') e_-^\dagger(n')] \quad (\text{A IV.2})$$

So erhalten wir

$$I C I = \frac{M\omega_0^2}{2} \sum_n \sum_{n', n''} \sum_k [e_+(n') e_+^\dagger(n') + e_-(n') e_-^\dagger(n')] \cdot$$

$$[e_k(n+E_k) - e_k(n)] [e_k^\dagger(n+E_k) - e_k^\dagger(n)] [e_+(n'') e_+^\dagger(n'') + e_-(n'') e_-^\dagger(n'')]$$

Da es sich um langwierige aber ähnliche Rechnungen handelt, werden wir nur für einen Term die Umformung vornehmen.

Beachten wir noch, daß folgende Beziehung zwischen $e_{\pm}(n)$ und $e_k(n)$ gilt,

$$e_k^\dagger(n) e_{\pm}(n) = \frac{\exp(\pm i \frac{\pi}{3} k)}{\sqrt{2}} \delta_{n, n'}$$

so erhalten wir z.B. für den Term

$$\begin{aligned}
 & \frac{M\omega_0^4}{2} \sum_{N, N', N''} \sum_{k=0}^5 e_+(N') e_+^\dagger(N'') \left[e_k(N+E_k) - e_k(N) \right] \left[e_k^\dagger(N+E_k) - e_k^\dagger(N) \right] e_+(N') e_+^\dagger(N'') \\
 &= \frac{M\omega_0^4}{2} \sum_{N, N', N''} \sum_{k=0}^5 e_+(N') \left[\delta_{N', N+E_k} - \delta_{N', N} \right] \frac{e^{-i\frac{\pi}{3}}}{\sqrt{2}} \left[\delta_{N+E_k, N''} - \delta_{N, N''} \right] \frac{e^{i\frac{\pi}{3}}}{\sqrt{2}} e_+^\dagger(N'') \\
 &= \frac{M\omega_0^2}{4} \sum_N \sum_k \left[e_+(N+E_k) - e_+(N) \right] \left[e_+^\dagger(N+E_k) - e_+^\dagger(N) \right]
 \end{aligned}$$

Und durch Umnummerierung erhalten wir für diesen Term

$$\frac{M\omega_0^2}{2} \sum_N \sum_k e_+(N) (e_+^\dagger(N) - e_+^\dagger(N+E_k)) \quad (\text{A IV.3a})$$

Auf ähnliche Weise können wir auch die anderen Termen umformen, so daß wir insgesamt für C folgenden Ausdruck erhalten:

$$\begin{aligned}
 C = & \frac{M\omega_0^2}{2} \sum_N \sum_k \left[e_+(N) \left[e_+^\dagger(N) - e_+^\dagger(N+E_k) \right] + e^{-2i\frac{\pi}{3}} \left[e_+^\dagger(N) - e_+^\dagger(N+E_k) \right] \right] \\
 & + \frac{M\omega_0^2}{2} \sum_N \sum_k \left[e_-(N) \left[e_+^\dagger(N) - e_+^\dagger(N+E_k) \right] + e^{2i\frac{\pi}{3}} \left[e_+^\dagger(N) - e_+^\dagger(N) \right] \right] \quad (\text{A IV.3})
 \end{aligned}$$

- A N H A N G V -

In Abschnitt III wurde erklärt, daß für die Bestimmung der Integrationskonstante, die Differenzengleichungen (II.24) am Rande zu untersuchen sind. Sollen die Differenzengleichungen auch am Rande erfüllt sein, so müssen die Beiträge der fehlenden Nachbarpunkte für sich verschwinden.

Einfachheitshalber wird die Begrenzung des Kristalls als kreisförmig mit dem Radius R angenommen. Wir betrachten den Fall, daß zwei Nachbarn fehlen, z.B. zu $k = 0$ und $k = 1$ gehörenden (siehe Abbildung 3).

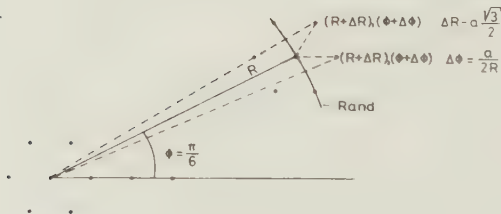


Abb. 3 Untersuchung des Kristalls am Rande.
Die zu $k = 0$ und $k \neq 1$ gehörenden
Nachbarn fehlen.

Aus der Differenzengleichung (II.24a) erhalten wir

$$\left[v(N+E_0) - v(N) + v(N+E_1) - v(N) + w(N+E_0) - w(N) \right] + e^{-2i\frac{\pi}{3}} \left[w(N+E_1) - w(N) \right] = 0 \quad (\text{A V.1a})$$

und aus (II.24b)

$$\left[w(N+E_0) - w(N) + w(N+E_1) - w(N) + v(N+E_0) - v(N) \right] + e^{2i\frac{\pi}{3}} \left[v(N+E_1) - v(N) \right] = 0 \quad (\text{A V.1b})$$

Mit Hilfe der Gleichungen (III.5) und (III.1) erhalten wir (siehe Abbildung)

$$v(N+E_0) - v(N) = v'(R) \Delta R.$$

$$v(N+E_1) - v(N) = v'(R) \Delta R \quad (\text{A V.2})$$

$$w(N+E_0) - w(N) = e^{2i\phi} \tilde{w}'(R) \Delta R - 2i e^{2i\phi} \tilde{w}(R) \Delta \phi$$

$$w(N+E_1) - w(N) = e^{2i\phi} \tilde{w}'(R) \Delta R + 2i e^{2i\phi} \tilde{w}(R) \Delta \phi$$

Setzen wir diese Beziehungen in (A V.1) ein, und beachten wir, daß

$$\exp(2i\phi) = \exp(i\frac{\pi}{3})$$

gilt, so erhalten wir leicht

$$\Delta R \left[\left(e^{i\frac{\pi}{3}} + e^{-i\frac{\pi}{3}} \right) \tilde{w}'(R) + 2v'(R) \right] + \Delta \phi \left[\left(e^{-i\frac{\pi}{3}} - e^{i\frac{\pi}{3}} \right) 2i \tilde{w}(R) \right] = 0 \quad (\text{A V.3a})$$

und

$$\Delta R \left[\left(1 + e^{2i\frac{\pi}{3}} \right) v'(R) + 2e^{2i\frac{\pi}{3}} \tilde{w}'(R) \right] = 0 \quad (\text{A V.3b})$$

Setzen wir hier $\Delta R = a \frac{\sqrt{3}}{2}$ und $\Delta \phi \approx \frac{a}{2R}$ und beachten wir, daß folgende Beziehungen

$$\begin{aligned} e^{i\frac{\pi}{3}} + e^{-i\frac{\pi}{3}} &= 1 \\ e^{-i\frac{\pi}{3}} - e^{i\frac{\pi}{3}} &= -i\sqrt{3} \\ 1 + e^{2i\frac{\pi}{3}} &= e^{i\frac{\pi}{3}} \end{aligned} \quad (\text{A V.4})$$

gelten, so erhalten wir leicht die Gleichungen (III.9)

$$\tilde{w}'(R) + 2v'(R) + \frac{2}{R} \tilde{w}(R) = 0 \quad (\text{A V.5a})$$

$$v'(R) + 2\tilde{w}'(R) = 0. \quad (\text{A V.5b})$$

- A N H A N G VI -

Frequenzspektrum des Modells.

Für die Berechnung der Schwankungsquadrate nach der Gleichung (IV.8) ist es notwendig, die Schallgeschwindigkeit

$$v_s = \frac{\omega}{|\dot{q}|} \quad (\text{A VI.1})$$

zu kennen. Voraussetzung ist, daß man das Frequenzspektrum des zweidimensionalen hexagonalen Gitters kennen muß. Wir werden deshalb im Folgenden das Frequenzspektrum berechnen.

Zwischen allen Teilchen sollen dieselben Kräfte herrschen, und diese sollen so schnell abnehmen, daß man sie nur zwischen nächsten Nachbarn zu berücksichtigen braucht. Den Gleichgewichtsabstand bezeichnen wir mit a .

In der harmonischen Näherung, in der die potentielle Energie ein quadratischer Ausdruck in den Auslenkungen ist, sind die Kräfte den Auslenkungen proportional. Derartige Kräfte kann man sich mechanisch durch Federn realisiert denken; man bezeichnet daher den Proportionalitätsfaktor C als "Federkonstante".

Die Verschiebung des N ten Gitterteilchens aus der Ruhelage sei $\vec{u}(N)$, seine Masse bezeichnen wir mit M , dann ergibt sich folgende Bewegungsgleichung für unser Modell:

$$M \ddot{\vec{u}}(N) = C \sum_{k=0}^5 \vec{e}_k \vec{e}_k (\vec{u}(N+\vec{e}_k) - \vec{u}(N)) \quad (\text{A VI.2})$$

Zur Lösung der Bewegungsgleichung machen wir den Ansatz:

$$\vec{u}(N) = \vec{A} \cos(\vec{q} \vec{x}_N - \omega t) \quad (\text{A VI.3})$$

Hierin bedeuten $\vec{A}$ die Amplitude der Schwingung, $\vec{q}$ der Ausbreitungsvektor der Gitterschwingung, $\vec{x}_N$ ist der Ortsvektor des Nten Gitterteilchens, und ω die Frequenz der Schwingung.

Für $\vec{u}(N+E_K)$ erhalten wir dann

$$\begin{aligned} u(N+E_K) &= \vec{A} \cos[\vec{q}(\vec{x}_N + \vec{e}_K a) - \omega t] = \\ &= A \cos(\varphi_N + \beta_K) \end{aligned} \quad (\text{A VI.4})$$

wobei wir als Abkürzung

$$\vec{q} \vec{x}_N - \omega t = \varphi_N \quad (\text{A VI.5a})$$

$$\text{und} \quad \vec{q} \vec{e}_K a = \beta_K \quad (\text{A VI.5b})$$

eingeführt haben.

Mit dem Ansatz (A VI.3) und (A VI.4) erhalten wir für die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} -\omega^2 \vec{A} \cos \varphi_N &= \\ &= \omega_0^2 \sum_{k=0}^s \vec{e}_k (\vec{e}_k \vec{A}) [\cos \varphi_N \cos \beta_k - \sin \varphi_N \sin \beta_k - \cos \varphi_N] \end{aligned} \quad (\text{A VI.6})$$

wobei

$$\omega_0^2 = \frac{c}{M} \quad (\text{A VI.7})$$

gesetzt wurde.

Diese Gleichung muß für alle N gelten. Hieraus folgt speziell für $N=0$ zunächst:

$$\cos \omega t \left[\omega^2 \vec{A} + \omega_0^2 \sum_k \cos \beta_k \vec{e}_k (\vec{e}_k \vec{A}) - \omega_c^2 \sum_k \vec{e}_k (\vec{e}_k \vec{A}) \right] = \quad (\text{A VI.8})$$

$$= - \sin \omega t \omega_0^2 \sum_k \sin \beta_k \vec{e}_k (\vec{e}_k \vec{A}).$$

Die Gleichung (A VI.8) muß für alle Zeiten gelten und speziell auch für $t=0$. Hiermit erhalten wir zwei Bedingungen, nämlich

$$\sum_k \sin \beta_k \vec{e}_k (\vec{e}_k \vec{A}) = 0 \quad (\text{A VI.9a})$$

$$\text{und} \quad (\omega^2 - 3\omega_0^2) \vec{A} + \omega_0^2 \sum_k \cos \beta_k \vec{e}_k (\vec{e}_k \vec{A}) = 0 \quad (\text{A VI.9b})$$

Da

$$\sum_k \vec{e}_k (\vec{e}_k \vec{A}) = 3 \vec{A} \quad (\text{A VI.10})$$

gilt, wenn wir die Summation über k ausführen.

Aus der ersten Bedingung erhalten wir keine Auskunft, da sie identisch verschwindet. Aus der zweiten Bedingung und Gleichung (A VI.10) erhalten wir

$$\sum_k \cos \beta_k \vec{e}_k (\vec{e}_k \vec{A}) = \Lambda \sum_k \vec{e}_k (\vec{e}_k \vec{A}) \quad (\text{A VI.11})$$

Wobei

$$\Lambda = \frac{1}{3} \left(3 - \frac{\omega_c^2}{\omega_0^2} \right) \quad (\text{A VI.12})$$

gesetzt wurde.

Führen wir die Summe über κ aus, und drücken wir die $\vec{e}_\kappa$ durch $\vec{e}_0$ und $\vec{e}_1$ aus, so erhalten wir leicht:

$$\vec{e}_0 \left[(\cos \beta_0 - 1) (\vec{e}_0 \vec{A}) - (\cos \beta_2 - 1) (\vec{e}_1 - \vec{e}_0) \vec{A} \right] \quad (\text{A VI.13})$$

$$+ \vec{e}_1 \left[(\cos \beta_1 - 1) (\vec{e}_1 \vec{A}) + (\cos \beta_2 - 1) (\vec{e}_1 - \vec{e}_0) \vec{A} \right] = 0$$

Da $\vec{e}_0$ und $\vec{e}_1$ linear unabhängig sind, müssen die Koeffizienten verschwinden, so daß man folgende zwei Gleichungen erhält:

$$(\cos \beta_0 - 2 + \cos \beta_2) (\vec{e}_0 \vec{A}) + (1 - \cos \beta_2) (\vec{e}_1 \vec{A}) = 0 \quad (\text{A VI.14})$$

$$(1 - \cos \beta_2) (\vec{e}_0 \vec{A}) + (\cos \beta_1 - 2 + \cos \beta_2) (\vec{e}_1 \vec{A}) = 0$$

Damit das Gleichungssystem eine Lösung hat, muß die Determinante verschwinden, d.h.

$$\begin{vmatrix} \cos \beta_0 - 2 + \cos \beta_2 & 1 - \cos \beta_2 \\ 1 - \cos \beta_2 & \cos \beta_1 - 2 + \cos \beta_2 \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{A VI.15})$$

Man erhält

$$3 \Lambda_{\pm} = \cos \beta_0 + \cos \beta_1 + \cos \beta_2 \pm$$

(A VI.16)

$$\pm \sqrt{\cos^2 \beta_0 + \cos^2 \beta_1 + \cos^2 \beta_2 - \cos \beta_0 \cos \beta_1 - \cos \beta_0 \cos \beta_2 - \cos \beta_1 \cos \beta_2}$$

Setzen wir

$$\beta_0 = a |q| \cos \phi$$

$$\beta_1 = a |q| \cos \left(\frac{\pi}{2} - \phi \right) \quad (\text{A VI.17})$$

$$\beta_2 = a |q| \cos \left(\frac{2\pi}{3} - \phi \right).$$

ein, und entwickeln wir $\cos \beta$ bis zu Gliedern vierter Ordnung, so erhalten wir aus Gleichung (A VI.16) und (A VI.12)

$$\omega_+^2 = \frac{9}{8} \omega_c^2 a^2 |q|^2 \quad (\text{A VI.18})$$

$$\omega_-^2 = \frac{3}{8} \omega_c^2 a^2 |q|^2$$

Damit erhalten wir zwei Schallgeschwindigkeiten, eine longitudinale

$$v_c = \frac{\omega}{|q|} = \sqrt{\frac{9}{8}} \omega_c a. \quad (\text{A VI.19a})$$

und eine transversale

$$v_t = \frac{\omega}{|q|} = \sqrt{\frac{3}{8}} \omega_0 a. \quad (\text{A VI.19b})$$

Für die Auswertung der Gleichung (IV. 8) wird ein Mittelwert der Schallgeschwindigkeit gebildet; und zwar folgendermaßen:

$$\left\langle \frac{1}{v^2} \right\rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_l^2} + \frac{1}{v_t^2} \right) \quad (\text{A VI.20})$$

Zusammenfassung

Es wird eine neue Methode zur Berechnung von Abstandsschwankungen zweier Atome in einem zweidimensionalen Kristall infolge der thermischen Bewegung angegeben. Es wird aus Gründen, die in der Einleitung dargelegt wurden, ein hexagonales Gitter zugrundegelegt.

Im Gegensatz zur Frenkelschen Methode braucht keine willkürliche Annahme hinsichtlich des Frequenzspektrums gemacht zu werden. Es wird jedoch Einfachheit halber vorausgesetzt, daß die Temperatur hinreichend hoch ist, so daß man für die Berechnung des thermischen Mittelwertes einer Observablen die klassische Boltzmann-Statistik anwenden kann.

Voraussetzung für die Gültigkeit dieser Methode ist lediglich, daß die harmonische Näherung für die potentielle Energie benutzt werden darf und das Wechselwirkungen nur zwischen nächsten Nachbarn bestehen.

Für die Abstandsschwankungen zwischen zwei Gitterteilchen in den Positionen 0 und N erhält man den Ausdruck

$$\overline{\delta r^2}_{NO} = - \frac{2kT}{M\omega_0^2} \operatorname{Re} [\nu(N) - \nu(0) + \tilde{\nu}(N) - \tilde{\nu}(0)]$$

Die Größen ν und $\tilde{\nu}$ lassen sich aus einer Matrix C^{-1} gewinnen, die "partiell invers" zur Kopplungsmatrix C ist (Gleichung I.27). Die Gleichungen zur Bestimmung dieser Funktionen haben die Form von Differenzgleichungen (siehe Abschnitt II). Für hinreichend kleine Kristalle kann man die Differenzgleichungen mit Hilfe eines Computer-Programms exakt lösen. Für große Kristalle bietet sich aber ein anderer Weg. Und zwar kann man die Differenzgleichungen in Differentialgleichungen überführen und man findet (siehe Abschnitt III) eine analytische Lösung, die die notwendigen Nebenbedingungen, Randbedingungen und Stetigkeitsforderungen erfüllt.

Diese Lösung wird mit der exakten Lösung der Differenzgleichungen eines hexagonalen Gitters, bestehend aus 169 Gitterteilchen verglichen. Zwischen den beiden Lösungen besteht eine recht gute Übereinstimmung (etwa 1%) für Abstände, die mindestens drei Gitterkonstante betragen.

Deshalb kann man die kontinuierliche Lösung für die Bestimmung der Abstandsschwankungen nicht zu nahe benachbarter Atome als geeignet ansehen. Für nahe benachbarte Teilchen sind hingegen die diskreten Werte die richtigeren (siehe Abschnitt IV).

Im Grenzfall des unendlich ausgedehnten Kristalls erhält man für die Abstandsschwankungen zwischen zwei Gitterteilchen in den Positionen N und O mit dem Abstand r den Ausdruck

$$\overline{(\delta r_{NO})^2}_{T_s} = \frac{kT}{M\omega_o^2} \frac{8}{3\sqrt{3}\pi} \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{8} \frac{r_o^2}{r^2} + \ln \frac{r}{r_o} \right)$$

Die Ergebnisse unserer Methode wurden noch mit den Ergebnissen von Frenkel verglichen. Frenkel erhielt für die Abstandsschwankungen mit einer Reihe vereinfachter Annahmen den Ausdruck

$$\overline{(\delta r_{NO})^2}_{F_r} = \frac{kT}{M\omega_o^2} \frac{8}{3\sqrt{3}\pi} \left(\frac{\pi^2}{8} + \ln \frac{2}{\pi} + \ln \frac{r}{r_o} \right).$$

Das asymptotische Verhalten der Abstandsschwankungen ist in beiden Fällen das gleiche, falls man die in der Frenkelschen Formel auftretende Schallgeschwindigkeit v_s durch einen geeigneten Mittelwert der longitudinalen und transversalen Schallgeschwindigkeit, nämlich

$$\left\langle \frac{1}{v_s^2} \right\rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_l^2} + \frac{1}{v_t^2} \right)$$

ersetzt.

Für nahe benachbarte Atome unterscheiden sich die Abstandsschwankungen etwa um den Faktor

$$\frac{(\overline{\delta_{\gamma_{N0}}^2})_{Fv}}{(\overline{\delta_{\gamma_{N0}}^2})_{T_0}} = 1,2$$

Interessant ist, daß ein Resultat ohne irgendwelche Annahmen über die Dispersionskurve gewonnen werden konnte. Wie in Anhang VI näher ausgeführt ist, lässt sich für unser Modell die Dispersionskurve exakt berechnen. Wir haben das (ziemlich komplizierte) Ergebnis nur für den Grenzfall kleinerer Wellenzahlen ausgewertet, wobei sich zeigte, daß die Annahme eines einfachen Dispersionsgesetzes, wie es die Frenkelsche Rechnung voraussetzt, nicht erfüllt ist. Man findet vielmehr einen beträchtlichen Unterschied zwischen der longitudinalen und transversalen Ausbreitungsgeschwindigkeit der elastischen Wellen. (Faktor $\sqrt{3}$).

Literaturverzeichnis

- [1] JAMES, R.W.: The Optical Principles of the Diffraction
of X-Rays. London 1958
- [2] ZACHARIASEN, W.H.: Theory of X-Ray Diffraction in
Crystals. New York 1945
- [3] DEBYE, P: Verh. Dtsch. Phys. Ges. 15. 738. 1913
Über die Intensitätsverteilung in den
mit Röntgenstrahlen erzeugten Interfe-
renzbildern.
- [4] DEBYE, P: Ann. Phys. 43. 49. 1914
Interferenz von Röntgenstrahlen und
Wärmebewegung.
- [5] PEIERLS, R: Annales de l'Institut Henri Poincare
5, 177. 1935
- [6] PEIERLS, R: Helv. Phys. Acta 7, Sonderheft, 81,
1936
- [7] FRENKEL, J.I.: Kinetische Theorie der Flüssig-
keiten. Deutscher Verlag der
Wissenschaften. S.146-149. 1957
- [8] WALKER, C.B. and KEATING, D.T.: Acta Cryst.
1961, 14, 1170.
- [9] BORN, M. Rep. Progr. Physics 9 (1942) 294

Die vorliegende Arbeit wurde am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft in Berlin-Dahlem in der Abteilung von Herrn Professor Hosemann geschrieben. Herrn Professor Hosemann bin ich für seine äußerst fruchtbaren Anregungen und häufigen Diskussionen zu aufrichtigem Dank verpflichtet.

In gleicher Weise gilt mein Dank den Herren Professoren Dr. Niehrs und Dr. Theis für ihre freundliche Bereitwilligkeit, die vorliegende Arbeit zu diskutieren und zu begutachten.

Gleichfalls gilt mein Dank Herrn Dr. Weick für sein stetes lebhaftes Interesse, welches meine Arbeit sehr gefördert hat.

Außerdem danke ich der Max-Planck-Gesellschaft für die finanzielle Unterstützung meiner Arbeit.

Lebenslauf

Am 20.12.1940 wurde ich als Sohn des Landwirts Georgios Tsobanis und seiner Ehefrau Evangelia in Yannitsa, Griechenland, geboren.

Von 1946 bis 1952 besuchte ich die Grundschule in Yannitsa und anschließend das Gymnasium, wo ich im Sommer 1958 die Reifeprüfung ablegte.

Im Wintersemester 1959 begann ich das Studium der Physik an der Freien Universität Berlin.

Dort legte ich im Wintersemester 1963 die Diplom-Vorprüfung in Physik ab. Meine Diplomarbeit führte ich im II. Physikalischen Institut der Freien Universität Berlin unter Anleitung von Herrn Professor Dr. R. Honerjäger durch. Die Diplomprüfung legte ich im Mai 1966 ab.

Anschließend war ich als Doktorand am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft tätig, wo unter Anleitung von Herrn Professor Dr. R. Hosemann die vorliegende Arbeit entstand.

